

307.226

W.

19
1971

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

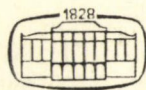
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

2

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

RUBINLASER MODE-LOCKING ÜZEMMÓDJÁNAK MEGVALÓSÍTÁSA ÉS A KAPOTT NAGYINTENZITÁSÚ PIKOSZEKUNDUMOS IMPULZUSOK IDŐTARTAMÁNAK MÉRÉSE*

FARKAS GYÖZŐ, KISS GÁBOR és RITVAY MIKLÓSNE

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Pikoszekundum (10^{-12} sec) időtartamú gigawatt (10^9 W) intenzitástartományba eső laserimpulzussorozat kibocsátására szolgáló ún. mode-locking laser üzemmód megvalósítása annál könnyebb, minél szélesebb fluoreszcenciasávval rendelkezik a laseranyag. Ezért elsősorban a neodymium laserek alkalmasak erre a célra, míg a rubinlaser keskenyebb sávzélessége következtében nehézségek lépnek fel. Az üzemmód megvalósítása az irodalmi adatok szerint még neodymium esetén is csupán speciálisan erre a célra kialakított optikai elemek alkalmazásával történt. A jelen munkában megmutattuk, hogy a mode-locking üzemmód rubinlaser esetén megvalósítható más hagyományos laser-üzemmódoknál használatos, közönséges optikai elemek alkalmas beállításával.

Az eljárás segítségével gigawatt intenzitású és 10 pikoszekundum időtartamú fényimpulzusokat nyertünk. Az elektronikus eljárásokkal nem vizsgálható pikoszekundumos impulzusok időtartamát a nemlineáris optika által szolgáltatott optikai időmérési módszerrel határoztuk meg.

1. §. Bevezetés

A KFKI Fizikai Optikai Laboratóriumában folytatott nemlineáris optikai kutatások [1, 2, 3, 4, 5] során egyre rövidebb időtartamú és egyre nagyobb intenzitású fényimpulzusok megvalósítására [6, 7] került sor.

Tekintsük át a méréseink során erre vonatkozóan kialakított módszereket.

A szilárdtest laserek legegyszerűbb üzemmódja, melyet a kezdeti időben használtak, a *szabad generáció*. Ez esetben a laser aktív anyagának flash-lámpákkal történő milliszekundum időtartamú optikai pumpálásakor egy megfelelő optikai gerjesztési küszöbérték elérése után szabadon megindul a lasersugárzás. A kilépő lasersugárzás energiafogyasztása az aktív anyag gerjesztettségét nem engedi lényegesen a küszöbérték fölé emelkedni. A megjelenő laserintenzitás időben statisztikusan változó csúcsokból, ún. spike-okból tevődik össze és néhány tized milliszekundumig tart. Az így kiadódó átlagteljesítmény 10 KW nagyságrendű.

A szabad generációval ellentétben egyetlen igen nagy intenzitású és rövid időtartamú laserimpulzus nyerhető a következő módszer alkalmazásával. A rezonátoron belül elhelyezett megfelelő optikai zár segítségével a laserműködés beindulását mindaddig késleltetjük, míg optimális gerjesztettséget ér el a laser aktív anyaga. Ekkor a lasersugárzás egyetlen spike, az ún. *óriás impulzus*, vagy *giant pulse* alakjában jelenik meg, melyről a módszer nevét is kapta. Ennek időtartama 10—50 nsec, az intenzitás csúcsértéke pedig néhány 100 MW-ot ($\sim 10^8$ W) is elérhet.

* Érkezett 1970. márc. 12.

Az említett optikai zárat, mely a rezonátor jósági tényezőjét, „Q”-ját kapcsolja át, „Q”-kapcsolónak nevezzük. Ez megvalósítható kívülről vezérelt ún. aktív zárral (például Kerr-cella, forgótükör) [6], vagy olyan optikai szűrőkkel, melyek éppen a laserfény nagy intenzitásának hatására átlátszókká válnak, ún. passzív szűrők, vagy passzív Q-kapcsolók [7, 8].

A legutóbbi kutatások során kiderült, hogy az előzőnél még kedvezőbb üzemmód valósítható meg. A laser aktív anyaga bizonyos véges frekvenciaintervallumban sugároz, melyből a rezonátor két tükrre mint Fabry—Perot rendszer, a frekvenciák egy meghatározott sorának megfelelő módusok kialakulását teszi lehetővé.

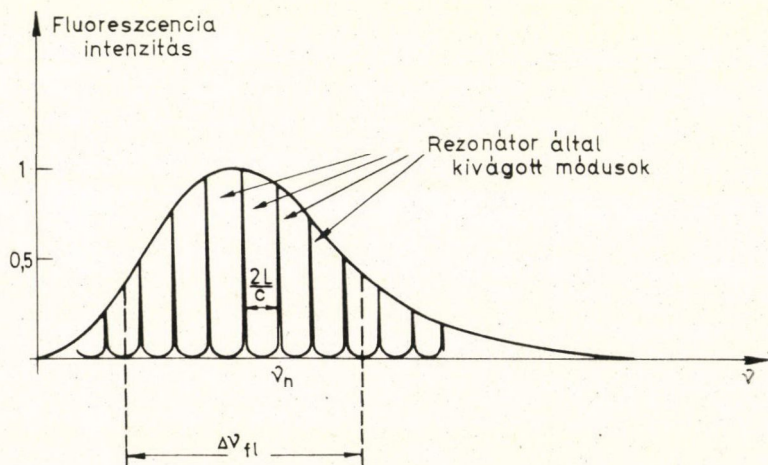
Ha ezen módusokat valamilyen eljárással *rögzített fázissal* összelebegtetjük — „mode-locking” —, interferencia révén egy rövid impulzusból álló sorozat lép ki a laserből. Egy sorozat kb. 10—100 rövid impulzusból áll, melyek intenzitása szabályosan változik. Éppen a fázisok kötöttségéből következően a sorozat egyes tagjai teljesen azonos térbeli és időbeli fizikai tulajdonságokkal rendelkeznek egy meglehetősen széles, szabályosan változó intenzitástartományban. Mindezek kiváló módszert jelentenek ahhoz, hogy egyetlen ilyen sorozattal a nemlineáris optikai kísérletek számára megkövetelt azonos fizikai körülmények között széles intenzitástartományban végezhesünk méréseket.

Az alábbiakban foglalkozni fogunk a mode-locking üzemmód elvi alapjaival, az általunk megvalósított kísérleti összeállítással és ismertetjük a kapott eredményeket.

2. §. A mode-locking üzemmód elvi alapjai

A jelen munkában a mode-locking üzemmóddal kapcsolatos elvi kérdéseknek csupán rövid összefoglalására szorítkozunk, mivel az irodalomban részletes tárgyalás található [9, 10, 11, 12] és ilyen témájú irodalmi összefoglalás rövidesen magyar nyelven is megjelenik [13].

A bevezetésben említettük, hogy a laser aktív anyaga, mely jelen esetben rubin, egy meghatározott véges $\Delta\nu$ frekvenciasávban sugároz ki fényt (lásd 1. ábra). A fény-



1. ábra

kibocsátó anyag azonban két párhuzamos tükörből álló optikai rezonátorban foglal helyet. A tükörpár, mely Fabry—Perot interferométert képez, csupán azon hullámformák, ún. axiális módusok kialakulását teszi lehetővé, melyek optikai ν_m frekvenciájára, ill. λ_m hullámhosszára a

$$\nu_m = \frac{c}{2L} m, \quad \text{ill.} \quad \lambda_m = \frac{2L}{m} \quad (1)$$

feltétel fennáll, ahol m nagy egész szám, L a két tükör távolsága, vagyis a rezonátor hossza, c pedig a fénysebesség. Látható, hogy a szomszédos ν_{n+1} , ν_n módusok között a frekvenciakülönbség, ill. a hullámszámkülönbség

$$\nu_{n+1} - \nu_n = \frac{c}{2L} (n+1 - n) = \frac{c}{2L} \equiv \nu_M \quad (2)$$

$$k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{2L} (n+1 - n) = \frac{2\pi}{2L} \equiv k_M$$

Ideális esetben a sugárzásban résztvevő módusok maximális N -száma az előzők alapján

$$N = \frac{\Delta\nu}{\nu_M} = \Delta\nu \frac{2L}{c} \quad (3)$$

Látjuk, hogy adott $\Delta\nu$ mellett N növelése L növelése útján érhető el.

A mode-locking elv azon tényen alapul, hogy az összes megengedett módus rögzített fázissal történő interferenciája megvalósítható, miáltal az interferencia eredményeképpen igen nagy periodikus amplitúdófluktuációk lépnek fel rövid időtartamok alatt. Mindezeket a Fourier összetevés szabályait alkalmazva, következőképpen láthatjuk be.

Tekintsük a rezonátorban kialakuló n -edik módus $E_n(x, t)$ amplitúdójának állóhullámformában felírt alakját,

$$E_n(x, t) = E_n \cos[(k_0 + nk_M)x] \cos[(\omega_0 + n\omega_M)t + \Phi_n] \quad (4)$$

itt az E_n amplitúdó és a Φ_n fázis statisztikus eloszlást követ és

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}, \quad \omega_0 = 2\pi\nu_0, \quad \nu_0 \lambda_0 = c$$

ahol ν_0 a rubin fluoreszcenciaspektrumának maximumához tartozó frekvencia.

Vizsgáljuk most azon ideális esetet, amikor minden módus már kötött fázisban rezeg és legyen

$$\Phi_n = 0 \quad (5)$$

minden n -re, továbbá legyen minden módus azonos amplitúdójú, tehát

$$E_n = E_0 \quad (6)$$

minden n -re. Ekkor a rezonátorban az eredő tér (4)-nek n -re történő összegezése által adódik

$$E(x, t) = \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} E_n(x, t) \quad (7)$$

A (4)-ben használt állóhullám egyszerű ismert trigonometrikus lépéssel két szembehaladó hullám összegére bontható, így (7) az

$$E(x, t) = E_0 \frac{1}{2} \sum [\cos \{(k_0 + nk_M)[x - ct]\} + \cos \{(k_0 + nk_M)[x + ct]\}] \quad (8)$$

alakban írható. A (8) összefüggés tovább alakítható a következő formában

$$E(x, t) = \frac{1}{2} E_0 \sum [e^{ink_M(x-ct)} \cos k_0(x-ct) + e^{ink_M(x+ct)} \cos k_0(x+ct)] \quad (9)$$

Az n -re történő összegezések elvégzése után

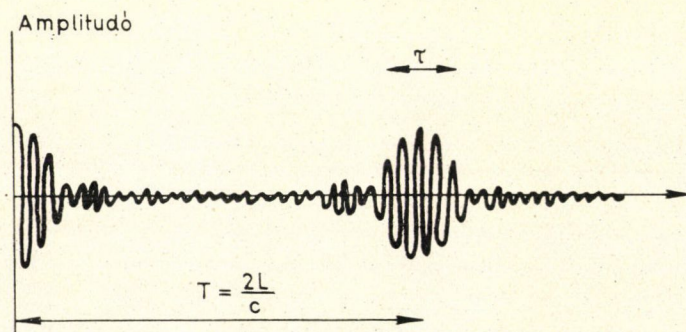
$$E(x, t) = E_0 \left[\frac{\sin \frac{N}{2} k_M(x-ct)}{\sin \frac{1}{2} k_M(x-ct)} \cos k_0(x-ct) + \frac{\sin \frac{N}{2} k_M(x+ct)}{\sin \frac{1}{2} k_M(x+ct)} \cos k_0(x+ct) \right] \quad (10)$$

A

$$\frac{\sin \frac{N}{2} k_M \xi}{\sin \frac{1}{2} k_M \xi} \equiv f(\xi) \quad (11)$$

rövidítéssel

$$E(x, t) = E_0 [f(x-ct) \cos k_0(x-ct) + f(x+ct) \cos k_0(x+ct)] \quad (12)$$



2. ábra

Látjuk, hogy a rezonátorban levő tér két ω_0 frekvenciájú $f(x \pm ct)$ burkoló amplitúdóval rendelkező szembehaladó hullám szuperpozíciója. Tekintsük most pl. a jobbra haladó részt (lásd 2. ábra), ennek jellemzői:

- Nagy N esetén a tér egy $T = \frac{2\pi}{\omega_M} = \frac{2L}{c}$ periódussal egymást követő rövid, $f(\xi)$ alakú impulzusok sorozatából áll.
- Az egyes rövid impulzusok szélességének nagy N értékekre vonatkozó közelítő értéke $f(\xi)$ első zérushelyével adható meg

$$\tau \approx \frac{1}{N\nu_M} = \frac{T}{N} = \frac{1}{\Delta\nu} \quad (13)$$

- Az amplitúdó csúcserőértéke (11) szerint az egyes összetevő amplitúdók N -szerese.

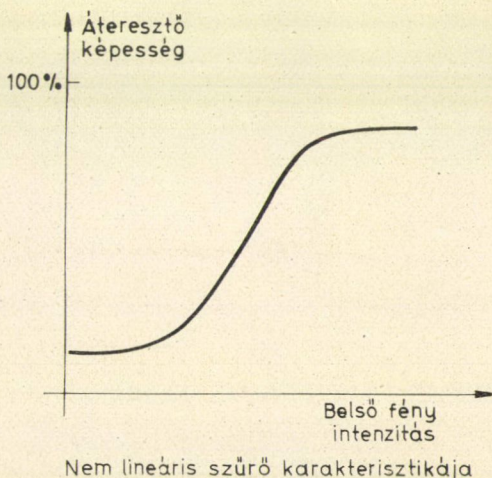
Továbbá x és t értékeit tetszőleges tartományba kiterjesztve a (12) tér mindkét irányban haladó részét tekintetbe véve, (12) egy olyan jobbrahaladó és balrahaladó sorozatot ír le, melyekben az $f(\xi)$ csúcsok az (5) választás folytán mindig a rezonátor-tükrök helyén fedik egymást. Így a rezonátor belsejében az egész tér leírható egyetlen, a tükrökön felváltva reflektálódó, jobbra-balrahaladó $f(\xi)$ alakú rövid impulzus jelenlétével. A rezonátoron kívül a detektálható tér a $f(\xi)$ alakú rövid impulzusok egymást T periódussal követő sorozatából áll.

Az eddig elmondottak megvalósításához az összes statisztikusan rezgő módus kötött fázissal történő összeadása szükséges, mely a következő két módszerrel: az aktív, ill. passzív moduláció útján érhető el.

1. A rezonátor belsejében egy kívülről $\nu_M = \frac{c}{2L}$ frekvenciával vezérelt „aktív”

optikai modulátort helyezünk el. A modulátor először a legnagyobb intenzitású középső ν_0 frekvenciát modulálja, miáltal megjelenik a $\nu_{\pm 1} = \nu_0 \pm \nu_M$ két oldal-frekvenciának megfelelő fény is, a modulátor helyén a Φ_0 kötött fázissal és a $\nu_{\pm 1}$ szomszédos módusokéval éppen azonos frekvenciával. Ezen frekvenciákon a más fázissal jövő rezgésekre a modulált rezonátor mindig veszteséget okoz, míg a helyes fázisúakra erősítést és további oldalfrekvenciák megjelenését idézi elő. Így az utóbbiak újabb és újabb oldalfrekvenciák helyes fázisát állítják be, minek következtében a helyes fázissal történő rezgés az egész $\Delta\nu$ szakaszra kiterjed és megvalósul a (12) hullámkép.

2. A rezonátorban egy olyan optikai szűrőt helyezünk el, melynek transzmissziója a fény intenzitásától nemlineárisan függ, ezt nevezik „passzív modulátor”-nak [9] (lásd 3. ábra). (Ilyen a bevezetésben említett „passzív Q-kapcsoló”.) Ekkor a kezdetben beinduló ν_0 körüli frekvenciájú két legnagyobb amplitúdójú szomszédos módus összelebegéséből egy ν_M frekvenciával gyengén modulált nyaláb alakul ki a rezonátorban, mely a szűrő transzmisszióját is kismértékben periodikusan változtatja. Ezen moduláció egy tetszőleges ν_n módus számára amplitúdómodulációt és ezáltal a $\nu_{n\pm 1} =$



3. ábra

$= v_n \pm v_M$ oldalsávok megjelenését eredményezi a *szűrő helye* által meghatározott Φ_0 fázissal. Így megnő a szűrő modulációjának mértéke és hatására az egyre távolabbi szomszédos módusok jó fázisban történő szukcesszív berezgése is létrejön. Az egész folyamat ismét a (12) hullámkép fellépéséhez vezet. Világos, hogy a folyamat kialakulásához T -nél kisebb relaxációs idővel rendelkező szűrő használata szükséges.

Az előzőekben említett azon eset, melynél a rezonátorban lévő tér egyetlen jobbra-balra haladó τ időtartamú rövid impulzus terjedésével írható le, csak akkor valósulhat meg, ha a fázisok összekapcsolását a rezonátor valamelyik *végpontjában* valósítjuk meg, vagyis, amikor a szűrőt valamelyik tükör közvetlen közelében helyezzük el. Amennyiben a szűrő a tükrőtől valamely „d” távolságra helyezkedik el, a (12) hullámképre vonatkozóan lefolytatott előbbi megfontolásunkhoz teljesen hasonló módon [11, 12] kell alkalmaznunk a Fourier-összetevés szabályait. Ekkor azt kapjuk, hogy egy második impulzus is fellép a rezonátorban, mely $\frac{2d}{c}$ időkéssel

követi az elsőt. Így pl. a $d = \frac{L}{2}$ esetben a követés periódusa éppen $T/2$. Ekkor minden második szomszédos módus $2v_M$ frekvenciával történő összelebegése is bekövetkezik [12].

A jelenségkör megfelelő részletességgel történő leírása [13] a laseranyag és a passzív szűrő nemlineáris jellegét is figyelembe vevő egyenletek megoldásával történik.

3. §. A kísérlet során nyerhető eredményekre vonatkozó számértékek előzetes megbecsülése

A 2. § eredményeinek birtokában a rubin $\Delta\nu$ sávszélességét ismerve, megbecsülhetjük a vizsgált fizikai mennyiségek ideálisan várható számértékeit.

a) Az impulzussorozat *teljes hosszát* a laser „giant-pulse” üzemmódja szabja meg [8], amely, mint az a régebbi mérésekből ismeretes, 20—200 nsec között változtatható az L , ill. a passzív szűrő koncentrációjának változtatásával.

b) Az impulzussorozat teljes hosszán belül a (12) által leírt egyes $f(\xi)$ csúcsok T követési periódusa

$$T = \frac{2L}{c}$$

Egy $L = 3$ m hosszú rezonátort használva

$$T = \frac{2 \cdot 3 \cdot 10^2}{3 \cdot 10^{10}} = 20 \text{ nsec} \quad (14)$$

c) A rövid $f(\xi)$ csúcsok időtartama (13) szerint

$$\tau \sim \frac{1}{\Delta\nu}$$

Rubin esetén

$$\Delta\nu \sim 4 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

így az elvileg elérhető optimális impulzushossz

$$\tau \sim \frac{1}{\Delta\nu} \sim 2 \cdot 10^{-12} \text{ sec} = 2 \text{ psec} \quad (15)$$

d) A módusok maximális N száma (3) alapján

$$N \sim \frac{\Delta\nu}{\nu_M} = \Delta\nu \frac{2L}{c}$$

Tehát $L = 3 \text{ m}$ esetén

$$N \sim 4 \cdot 10^{11} \frac{2 \cdot 3 \cdot 10^2}{3 \cdot 10^{10}} = 8 \cdot 10^3 \quad (16)$$

A csúcsteljesítmény $(NE_0)^2$ -tel arányos, míg statisztikus fáziseloszlás esetén az átlagteljesítmény NE_0^2 . Látjuk, hogy a teljesítménynövekedés N -szeres. Várható tehát, hogy a giant pulse megawattos átlagteljesítménye helyett mode-locking esetén gigawatt (10^9 W) értéket kapunk.

A számadatok alapján c) szerint a rövid impulzusok τ időtartamára vonatkozóan $\sim 10^{-12} \text{ sec}$ nagyságrend adódik. Ezen tény több újabb probléma megoldását teszi szükségessé:

1. A 10^{-12} sec -os tartományban elektronikus időmérések nem végezhetők. A pikoszekundumos időtartamokat új elvek alapján kell mérnünk.

2. A rövid fényimpulzusok a rezonátor valamely belső optikai elemén reflektálódva megtöbbszöröződhetnek. A jelenség egyrészt kiküszöbölhető, másrészt hasznosítható.

3. A passzív szűrő időállandójának τ -val összemérhetőnek kell lennie, mivel hosszabb időállandók esetén τ megnyúlik.

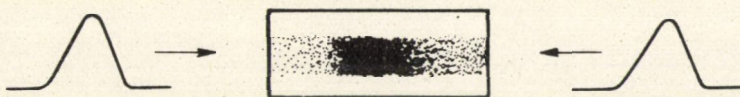
4.§. Laserimpulzusok mérése 10^{-12} sec -os tartományban nemlineáris optika segítségével

Tekintsünk egy fluoreszcens oldatot, melynek energianívói

$$\Delta E \sim 2h\nu_0 \quad (17)$$

távolságra vannak egymástól. Így az oldatnak a ν_0 frekvenciájú laserfényvel történő gerjesztése csak $2h\nu_0$ kvantumenergia egyidőben történő abszorpciója által mehet végbe. Így a fluoreszcenciaintenzitás a laserintenzitás négyzetével arányos, tehát tipikusan nemlineáris folyamatról van szó.

Amennyiben egy ilyen oldatot tartalmazó küvettán egy laserimpulzus halad át, az áthaladás útját egy fluoreszkáló csík jelzi. Találkoztassunk most két azonos, de szembehaladó rövid fényimpulzust a küvetta belsejében (lásd 4. ábra). Ekkor a talál-



4. ábra

kozás helyén, az impulzusok átfedési tartományában a laserintenzitás 4-ik, míg másutt a 2-ik hatványával arányos fluoreszcenciát kapunk, amely egy fényesebb folt alakjában jelenik meg. Megmérve a folt térbeli Δx hosszát, ismerve a folyadék n_0 törésmutatóját

$$\tau \approx \frac{n_0 \Delta x}{c} \quad (18)$$

Így az időmérés egyszerű távolságmérésre vezethető vissza [9, 14]. Például $n_0 = 1,5$ és $\tau = 1$ psec esetén

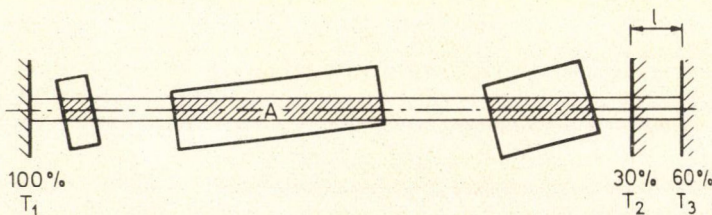
$$\Delta x \approx \tau \frac{c}{n_0} = 10^{-12} \frac{3 \cdot 10^{10}}{1,5} = 2 \cdot 10^{-2} \text{ cm} = 0,2 \text{ mm}$$

A rubin frekvenciáján használatos ilyen fluoreszcens anyagok a „Rhodamin 6 G” metanolos és a „9, 10-difenilantracén” benzolos oldatai [9].

5. §. A rövid fényimpulzusok reflexiója a rezonátor belső elemein

A 2. §-ban nyert eredmények alapján a rezonátor belsejében egyetlen rövid impulzus terjedését kell tekintetbe vennünk. Az ott elmondottak azonban csak azon ideális esetben érvényesek, amikor a rezonátor csupán a két tükörből áll. A rezonátor belsejében azonban még a rubin és a passzív szűrőt tartalmazó küvetta is helyet foglal. Amennyiben ezek véglapjai szintén az optikai tengelyre merőleges síkok, úgy ezek a 2. § feltételeitől eltérően több szubrezonátort képeznek, melyek újabb további rezonanciafeltételeket jelentenek. Vagy a szemléletes egyetlenimpulzusos képben maradvá, az egyetlen-impulzus jobbra-balra haladása közben belső reflexiókat szenvedve ezen felületeken megsokszorozódik, ami a kilépő fényben parazita közbülső impulzusok alakjában jelenik meg. Ezért célszerű az összes belső elem véglapját eleve Brewster-szögnek megfelelő síkokkal határolni.

Jelen kísérleti elrendezésünk összeállításához csupán a hagyományos laser-üzemmódokhoz használt, az optikai tengelyre merőleges véglapokkal határolt



5. ábra

elemek álltak rendelkezésünkre, ezért az ideális esetet úgy közelítettük meg, hogy ezen elemeket az optikai tengelyből kiforgattuk (lásd 5. ábra). Ezáltal a laserműködés a rubin „A” tartományára korlátozódott, ugyanakkor azonban ez a nyaláb számára oly aperturát jelent, mely a tengelytől eltérő irányú káros transzverzális módusok beindulásának lehetőségét is korlátozza [13].

Más szempontból a belső reflexiók felhasználhatók a psec-os időtartamok mérésére a következő módon [14, 9]. Helyezzük a nemlineáris fluoreszcens időmérő oldat küvettáját is a rezonátor belsejébe közvetlenül a T_2 kilépő tükör közelébe (5. ábra). Ugyanakkor egy további T_3 tükröt helyezünk el „ l ” távolságra a kilépő tükörrel párhuzamosan, a rezonátoron kívül. Ekkor a rezonátorban néhány egymást $2l/c$ idővel követő impulzust kapunk. Ezek közül az első T_2 -n visszafordulva, még szembetalálkozik a fluoreszcens oldatba érkező többi impulzussal, így a találkozások helyén világosan felvillanó, egymástól l/n_0 távolságra elhelyezkedő foltokat kapunk.

6. §. A passzív szűrő megválasztása

A 2. §-ban elmondottak szerint a passzív szűrő relaxációs idejét $\frac{2\pi}{\omega_M} = T$ -nél kisebb értékre kell választanunk. Másrészt az elméletileg adódó τ -val is összemérhetőnek kell lennie, hiszen τ -nál hosszabb relaxáció esetén két igen közeli impulzus nem különböztethető meg.

A passzív szűrő anyagát különféle oldószerekkel oldott festékek képezik, melyek éles abszorpciós sávval rendelkeznek a rubin ν_0 frekvenciája környékén. Az alábbi táblázatban foglaltuk össze [9] a rubinlaserhez használatos festékek adatait:

Festék	Oldószer	Fluoreszcencia élettartama	Elérhető τ értékek:
Vanadiumftalocianin	nitrobenzol	4 nsec	—
Kriptocianin	metanol	0,5 nsec	50 psec
Kriptocianin	acetón		20 psec
DDI	metanol		2—4 psec
DDI	víz		2 psec

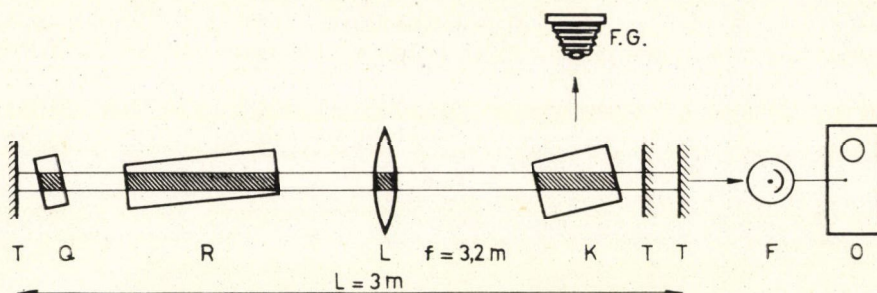
Látható, hogy a giant pulse üzem számára jól bevált vanádiumftalocianin benzolos oldata a mode-locking üzem számára használhatatlan, míg a legkedvezőbb eredményeket a DDI vizes oldatával lehet nyerni, melynek viszont a rövid kémiai bomlási ideje hátrányos.

7. §. A kísérleti elrendezés

Kísérleti elrendezésünket a következőképpen állítottuk össze (6. ábra). A rezonátort az egymástól $L=3$ méter távolságra levő T_1 (100%-os) és T_3 (60%-os) tükör képezte. Ebben foglalt helyet a 10 cm hosszú 1 cm átmérőjű rubinrúd, melyet az optikai tengelyből kissé kiforgattunk. A T_1 tükör közvetlen közelében helyezkedett el a Brewster-szögben kiforgatott Q nemlineáris szűrő, mely a Q -kapcsolású és mode-locking üzem megvalósítását biztosította. Ennek anyagát a DDI festék [15] metanolos oldata képezte.

A rezonátor másik végén foglaltak helyet a pikoszekundumos mérőrendszer (7. ábra) elemei:

a) A ferdeszögben elhelyezett 5 cm hosszú K küvetta; a rubin $2h\nu_0$ kvantumával gerjeszthető fluoreszcens anyag, a Rhodamin 6 G festék metanolos oldata.



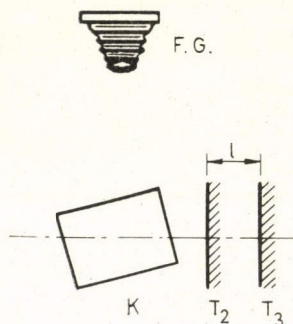
6. ábra

b) Az impulzus T_2 -ről reflektált része a rubin felé halad, az áteresztett rész T_3 -on visszafordulva pedig $2l/c$ késéssel követi. Így a következő periódusban már két impulzus jön a rubinról, melyek közül az első T_2 -n visszafordulva K -ban találkozik a másodikkal és így tovább. Esetünkben $l = 1,8$ cm, vagyis a találkozások

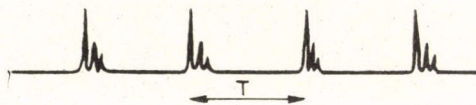
$$\frac{l}{n_0} = 1,2 \text{ cm} \quad (n_0 = 1,5 \text{ törésmutató})$$

térbeli periódussal jelentkeznek K -ban, melyet az FG fényképezőgéppel fotózunk.

Az impulzusok *elektronikus úton végezhető* detektálása a T_3 tükör által áteresztett nyaláb vizsgálatával történt. A nyalábot az F gyors vákuum fotocellával (Tungsram 90 CV) detektáltuk és az elektromos jelet egy 100 Mc sávszélességű „O” oszcilloszkópon vizsgáltuk. Világos, hogy a mode-locking sorozat a T_2, T_3 rendszer sokszorozása folytán nem az eredeti (12)-nek megfelelő egyes impulzusok $2L/c$ idővel egymást követő sorozatából áll, hanem a 8. ábrának megfelelően a sokszorozás folytán néhány mellékimpulzus is fellép. Ezen utóbbiak azonban



7. ábra



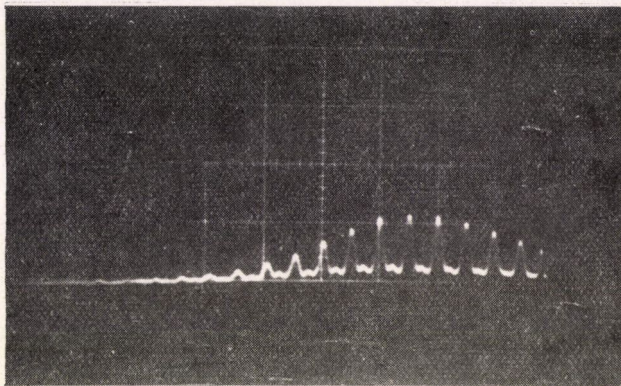
8. ábra

F -en, illetve a 100 Mc sávszélességű oszcilloszkópon integrálódva egyes, $2L/c$ -ben periodikus csúcsok formájában detektálhatók.

A teljesítmény értékeknek ismeretéhez szükséges *energiamérést* optikai kaloriméterrel [16] lehet elvégezni a sorozat *egészére* vonatkozóan. Így csupán csúcsok számának ismeretében az egy csúcsra eső átlagos teljesítmény becsülhető meg.

8. §. Mérési eredmények

1. Az impulzussorozat fotocellával, illetve oszcilloszkóppal detektált képe a 9. ábrán látható. A csúcsok követési távolsága megfelel az $L = 3$ m-es rezonátor-hossz esetén adódó $T = \frac{2L}{c} = 20$ nsec értéknek. A csúcsok félértékszélessége ~ 5 nsec, amit az oszcilloszkóp 100 Mc sávszélessége megenged.



9. ábra

2. Az egyes pikoszekundumos csúcsok által K -ban létrehozott periodikus fluoreszcencia-intenzitáseloszlás a 10. ábrán látható. A térbeli periodicitás az $l = 1,8$ cm és $n_0 = 1,5$ értékeknek megfelelően valóban 120 psec.

Az egyes foltok Δx félértékszélessége az ábra alapján

$$\Delta x \sim 0,2 \text{ cm.} \quad (19)$$



10. ábra

Így a pikoszekundumos csúcsok időtartama (19) alapján

$$\tau \sim \frac{n_0 \Delta x}{c} \sim 10 \text{ psec} \quad (20)$$

3. A kaloriméterrel történő energiámérés a sorozat egészére vonatkozóan

$$\bar{E} \simeq 0,1 \text{ Joule} \quad (21)$$

energiát adott. Mivel a 9. ábra alapján ~ 10 csúcs rendelkezik a maximális csúcs felének értékével, a kapott energia ~ 10 részre történő elosztása adja az egyetlen, csúcsra vonatkozó átlagos energiát. Vagyis

$$\bar{e} \sim \frac{\bar{E}}{10} \sim 10^{-2} \text{ Joule} \quad (22)$$

Mindezek alapján az egyes pikoszekundumos időtartamú csúcsok *átlagos teljesítménye*

$$P \sim \frac{\bar{e}}{\tau} \sim \frac{10^{-2} \text{ Joule}}{10^{-11} \text{ sec}} = 10^9 \text{ W} \equiv 1 \text{ GW} \quad (23)$$

A teljesítmény megbecslésekor nem kell figyelembe vennünk a 8. ábrán látható néhány járulékos impulzus jelenlétét, mivel a T_2, T_3 sokszorozó rendszert és a K küveltát a nyalábbal végzett fizikai mérések során már nem használjuk, így a rezonátorban ekkor már csak egyetlen pikoszekundum impulzus jelenlétét kell tekintenünk.

Köszönetet mondunk Náray Zsoltnak, Varga Péternek, Kertész Ivánnak és Horváth Zoltánnak értékes tanácsaikért, továbbá Titschka Kálmánnak, Czigány Imrének és Imre Lajosnak a mérések során nyújtott segítségükért.

IRODALOM

1. Gy. Farkas, Zs. Náray, P. Varga, Phys. Lett. 24 A, 134, 1967.
2. Gy. Farkas, I. Kertész, Zs. Náray, P. Varga, Phys. Lett. 25 A, 1475, 1967.
3. Gy. Farkas, I. Kertész, Zs. Náray, P. Varga, Phys. Lett. 25 A, 572, 1967.
4. Gy. Farkas, I. Kertész, Zs. Náray, Phys. Lett. 28 A, 190, 1968.
5. Farkas Gy., Horváth Z. KFKI Közlemények (megjelenés alatt.)
6. Farkas Gy., Náray Zs., Varga P. KFKI Közl. 14, 129, 1966.
7. Gy. Farkas, I. Kertész, Phys. Lett. 20, 364, 1966.
8. A. Szabó, R. A. Stein, J. Appl. Phys. 36, 1562, 1965.
9. A. J. DeMaria, W. H. Glenn, H. J. Brienza, M. E. Mack, Proc. IEEE, 57, 2, 1969.
10. N. G. Bászov, P. G. Krjukov, V. S. Letohov, FIAN Preprint, 122, 1969.
11. E. Garmire, A. Yariv, IEEE, J. QE-3, 222, 1967.
12. C. A. Sacchi, G. Soncini, O. Svelto, Nuovo Cim. 48, 58, 1967.
13. Kertész I., Magyar Fizikai Folyóirat.
14. J. A. Giordmaine, P. M. Rentzepis, S. L. Shapiro, K. W. Wecht, Appl. Phys. Lett. 11, 216, 1967.
15. M. E. Mack, IEEE J. QE-4, 1015, 1968.
16. M. Császár L., L. Csillag, Kertész I., Varga P. KFKI Közl. 14, 137, 1966.

SPIN-PARITÁS MEGHATÁROZÁS MULTIPÓLUS MOMENTUMOK SEGÍTSÉGÉVEL*

KRASZNOVSZKY SÁNDOR, PINTÉR GYÖRGY és TELBISZ FERENC

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

1. Bevezetés

Az utóbbi években nagyszámú instabil részecskét fedeztek fel. Minden egyes új részecske felfedezésénél felmerülő probléma kvantumszámaik meghatározása. Ebben az összefoglalásban a részecskék spinjének és paritásának meghatározásával foglalkozunk, ami a részecskék rendszerének is az alapját képezi. Megjegyezzük, hogy nem célunk ezen kvantumszámok lehetséges meghatározásának áttekintése, ezt pl. *R. Tripp* [1] összefoglalásában lehet megtalálni, hanem egy reprezentatív módszer [2] beható ismertetésére szorítkozunk. Az általunk kiválasztott módszer előnyét pl. abban láthatjuk, hogy minden szög és energia információt felhasznál. Megjegyezzük továbbá, hogy a relativisztikus tárgyalási mód lényegesen áttekinthetőbbé teszi az eredményeket, mint a szokásos, nemrelativisztikus számítások, amiről az olvasó is meggyőződhet, ha a jelen cikket a [3, 4] cikkekkel összehasonlítja. A nemrelativisztikus tárgyalás természetesen nem is minden esetben használható (p. A és γ -re bomló rezonanciák esetében).

Módszerünk főleg akkor hatékony, ha polarizációs méréseket is végzünk, pl. Fermion bomlások esetén, azonban bozon-rezonanciák esetén is használható [5]. Mint rámutattunk, az adott módszer erős, elektromágneses és gyenge bomlásoknál is egyaránt használható. Jelen dolgozatban két- és három-részecskére való bomlásokat vizsgálunk.

2. Sűrűségmátrix és multipólus paraméterek

Vizsgáljunk egy j spinű quantummechanikai rendszert. A legáltalánosabb tiszta állapotot a bázisvektorok lineáris szuperpozíciójaként állítjuk elő

$$\Psi_j = |j\rangle = \sum_{m=-j}^j a_m |j, m\rangle = \begin{pmatrix} a_j \\ a_{j-1} \\ \vdots \\ a_{-j} \end{pmatrix}$$

A hermitikus konjugált állapot

$$\Psi_j^\dagger = \langle j| = \sum_{m=-j}^j a_m^* \langle j, m| = (a_j^* a_{j-1}^* \dots a_{-j}^*)$$

ahol a_m^* az a_m komplex konjugáltja. Mivel a bázisvektorok orthonormáltak

* Érkezett 1970. ápr. 22. A VII. Elméleti Fizikai Nyári Iskolán elhangzott előadás.

$\langle j_1 m_1 | j_2 m_2 \rangle = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}$ és a tiszta állapotokat is normálni szeretnénk (azaz $\langle j | j \rangle = 1$)

$$\langle j | j \rangle = \sum_{m=-j}^j a_m^* a_m \langle j, m | j, m \rangle = 1$$

ezért

$$\sum_{m=-j}^j a_m^* a_m = 1$$

Ha egy „ q ” fizikai mennyiséget (amelynek egy Q operátort feleltetünk meg) akarunk megmérni egy fizikai rendszeren, amely a $|q\rangle$ tiszta állapotban van, akkor $\langle Q \rangle$ adja meg „ q ” mérőszámát

$$\langle Q \rangle = \langle q | Q | q \rangle = q \langle q | q \rangle = q$$

Ha Q -t az impulzus momentum operátor saját állapotainak rendszerében írjuk fel, akkor, mivel $|j\rangle$ $(2j+1)$ komponensű vektor, ezért Q -nak $(2j+1)(2j+1)$ elemű mátrixnak kell lennie. (Ez a Q mátrix reprezentációja a $|jm\rangle$ bázisvektorok rendszerében). Jelöljük e mátrix egy elemét $\langle j, k | Q | j, l \rangle$ -el, akkor

$$\langle Q \rangle = \sum_{k=-j}^j a_k^* \sum_{l=-j}^j a_l \langle j, k | Q | j, l \rangle.$$

A J_x, J_y, J_z, \bar{J}^2 impulzus momentum operátorokra vonatkozó felcserélési relációkból kapjuk, hogy a 0-tól különböző mátrixelemek a következők:

$$\langle j, m+1 | J_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle j, m-1 | J_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$\langle j, m+1 | J_y | j, m \rangle = -\frac{1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \quad (2.1)$$

$$\langle j, m-1 | J_y | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$\langle j, m | J_z | j, m \rangle = m$$

$$\langle j, m | \bar{J}^2 | j, m \rangle = j(j+1)$$

$$\begin{aligned} \text{pl: } \langle J_x \rangle &= \langle j | J_x | j \rangle = \sum_{m=-j}^{j-1} a_{m+1}^* a_m \langle j, m+1 | J_x | j, m \rangle + \sum_{m=-j}^{j-1} a_m^* a_{m+1} \langle j, m | J_x | j, m+1 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=-j}^{j-1} (a_m^* a_{m+1} + a_m a_{m+1}^*) \sqrt{(j-m)(j+m+1)} = \\ &= \sum_{m=-j}^{j-1} \text{Re}(a_{m+1}^* a_m) \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy a polarizációs vektor definíciója:

$$P_x = \frac{\langle J_x \rangle}{j} \quad P_y = \frac{\langle J_y \rangle}{j} \quad P_z = \frac{\langle J_z \rangle}{j}$$

vagy

$$\bar{P} = \frac{1}{j} \langle \bar{J} \rangle$$

Kevert állapotnak nevezzük azt az állapotot, amikor a $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(i)}$ tiszta állapotok $P^{(1)}, P^{(2)}, \dots, P^{(i)}$ valószínűséggel fordulnak elő az adott fizikai rendszerben. Ha egy „ q ” fizikai mennyiséget akarunk mérni egy olyan fizikai rendszeren, amely a saját állapotaiból összekevert állapotban van, akkor

$$\langle Q \rangle = \sum_i P^{(i)} \langle Q \rangle^{(i)} = \sum_i P^{(i)} \sum_{k=-j}^j a_k^{(i)*} \sum_{l=-j}^j a_l^{(i)} \underbrace{\langle j, k | Q | j, l \rangle}_{Q_{kl}} \quad (2.2)$$

A sűrűségmátrix definíciója:

$$\sum_i P^{(i)} a_k^{(i)*} a_l^{(i)} = \varrho_{lk} \quad \text{vagy} \quad (2.3)$$

$$\varrho = \sum_i P^{(i)} |j\rangle^{(i)} \langle j|^{(i)} = \sum_i P^{(i)} \begin{pmatrix} a_j^{(i)} \\ a_{j-1}^{(i)} \\ \vdots \\ a_{-j}^{(i)} \end{pmatrix} (a_j^{(i)*} a_{j-1}^{(i)*} \dots a_{-j}^{(i)*})$$

$$\text{ezzel} \quad \langle Q \rangle = \sum_{k=-j}^j \sum_{l=-j}^j \varrho_{kl} Q_{lk} = \sum (Q\varrho)_{kk} = \text{Tr}(Q\varrho) \quad (2.4)$$

A 2.4-es egyenletet is tekinthetnénk ϱ definíciójának [6] és ez az, ami ϱ -t $\langle Q \rangle$ -hoz kapcsolja. Ebből következnek ϱ tulajdonságai:

a) Minden hermitikus Q operátor esetén az a feltétel, hogy $\langle Q \rangle$ valós, megköveteli, hogy ϱ is hermitikus legyen, azaz

$$\varrho_{lk} = \varrho_{kl}^* \quad (2.5)$$

b) Az a feltétel, hogy az egységoperátornak 1 a várható értéke, megköveteli, hogy

$$\text{Tr}(1\varrho) = \text{Tr}\varrho = \sum_k \varrho_{kk} = 1$$

$$\text{azaz} \quad \text{Tr}(\varrho) = 1 \quad (2.6)$$

c) Az a feltétel, hogy minden nemnegatív sajátértékű operátornak nemnegatív átlagértéke van, megköveteli, hogy ϱ pozitív definit operátor legyen, amiből következik, hogy valamely mátrixreprezentációban ϱ minden diagonális eleme nemnegatív (kell, hogy legyen).

$$\varrho_{kk} \geq 0 \quad (2.7)$$

Írjuk fel Q -t a bázisvektorok diadikus szorzatösszegének segítségével:

$$Q = \sum_{m'=-j}^j |j, m'\rangle Q_{m'm} \langle j, m| \quad (2.8)$$

Forgassuk el a rendszert. Ekkor az elforgatott sűrűségmátrix

$$Q(R) = RQ R^{-1} = \sum_{m'm} R|j, m'\rangle Q_{m'm} \langle j, m|R^+ \quad (2.9)$$

vagy a mátrixelem:

$$Q_{m'm}(R) = \sum_{k,l=-j}^j D_{m'k}^j(R) Q_{kl} D_{ml}^{j*}(R) = \sum_{k,l} (-)^{m-l} D_{m'k}^j(R) D_{-m-l}^j(R) Q_{kl}$$

Itt felhasználtuk a D_{ml}^j mátrixelemek szimmetria relációját. A továbbiakban két D^j függvény szorzatának redukciós formuláját és a Clebsch—Gordan együtthatók szimmetria tulajdonságait felhasználva [7] a következő kifejezésre jutunk:

$$Q_{m'm}(R) = \sum_{L=0}^{2j} \sum_{M', M=-L}^L \left\{ \sum_{k,l=-j}^j (-)^{j-l} \langle j, j; l, -k | L, -M \rangle Q_{kl} \right\} D_{M'M}^L(R) \{ (-)^{j-m} \langle j, j; m', -m | L, M' \rangle \} \quad (2.10)$$

Q -t sorbafejthetjük $2j+1$ dimenziós T_{LM} irreducibilis tenzor operátorok szerint

$$Q = \frac{1}{2j+1} \sum_{LM} (2L+1) t_{LM}^* T_{LM} \quad (2.11)$$

Innen az R elforgatás esetén:

$$Q_{m'm}(R) = \frac{1}{2j+1} \sum_{L, M', M} (2L+1) t_{LM}^* D_{M'M}^L \{ T_{LM'} \}_{m'm} \quad (2.12)$$

(2.12) és (2.10)-es egyenletek összehasonlításával a $\sqrt{\frac{2L+1}{2j+1}}$ -s faktort t_{LM}^* -be beolvasztva és a Clebsch—Gordan együtthatók szimmetriatulajdonságát felhasználva kapjuk:

$$\{ T_{LM} \}_{mm'} = \langle j, m | j, L; m', M \rangle \quad (2.13)$$

(2.13)-ból és a Clebsch—Gordan együtthatók szimmetriatulajdonságából következik, hogy

$$T_{LM}^+ = (-)^M T_{L-M} \quad (2.14)$$

vagy

$$T_{LM} = (-)^M T_{LM}^+$$

A Clebsch—Gordan együtthatók orthogonalitásából és (2.13)-ból könnyen megállapítható a normalizálási feltétel:

$$Tr(T_{LM} T_{L'M'}^+) = \frac{2j+1}{2L+1} \delta_{LL'} \delta_{MM'} \quad (2.15)$$

(2.13)-ból kapjuk, hogy $T_{00} = I$, ezért

$$Tr(T_{LM}) = \delta_{L0} \delta_{M0} (2j+1) \quad (2.16)$$

(2.11) és (2.15)-ös egyenletből következik (vagy (2.12) és (2.10) összehasonlításával), hogy

$$t_{LM} = Tr(\varrho T_{LM}) = \langle T_{LM} \rangle \quad (2.17)$$

A T_{LM} szférikus tenzoroperátorok várható értékét statisztikus tenzoroknak vagy multipólus paramétereknek nevezzük.

Megjegyezzük, hogy az irodalomban a (2.11)-es egyenlet még a két következő alakban is használatos:

$$a) \quad \varrho = \sum_{LM} \langle U_L^M \rangle U_L^M \quad [6, 8]$$

$$b) \quad \varrho = \frac{1}{2j+1} \sum_{JM} q_M^L Q_M^J \quad [9, 10]$$

ahol

$$\{U_L^M\}_{m_1 m_2} = (-)^{j-m_2} \langle j, j, m_1, -m_2 | L, M \rangle$$

$$\{Q_M^J\}_{m' m} = (-)^{j-m} \langle j, j; m', -m | JM \rangle (2j+1)^{\frac{1}{2}}$$

$$U_L^{M+} = (-) U_L^{-M} \quad Q_M^{J+} = (-)^M Q_{-M}^J$$

$$Tr(U_L^{M'} U_L^{M+}) = \delta_{LL'} \delta_{MM'} \quad Tr(Q_M^{J+} Q_{M'}^{J'}) = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} (2j+1)$$

$$U_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \quad Q_0^0 = I$$

$$\langle U_L^M \rangle = Tr(\varrho U_L^M) q_M^J = Tr(Q_M^{J+} \varrho)$$

A különböző jelölések között az áttérés a ϱ definícióinak és a

$$(-)^{j-m_2} \langle j, j; m_1, -m_2 | L, M \rangle = \sqrt{\frac{2L+1}{2j+1}} \langle j, m_1 | j, L; m_2, M \rangle$$

azonosságnak a felhasználásával történhet.

$$pl: \quad t_{LM} = \sqrt{\frac{2j+1}{2L+1}} \langle U_L^M \rangle$$

Megjegyezzük, hogy a T_{LM} operátorokat hasonlóan kell megszerkeszteniünk a J_x, J_y, J_z impulzus momentum operátorokból, mint ahogy a gömbfüggvényeket alakítjuk ki a helyvektor komponenseiből.

Pl: $L=3$ -ra

$$T_{30} \propto J_z (-J_z - 3J^2)$$

$$T_{3\pm 1} \propto (5J_z^2 - J^2) \underbrace{(J_x \pm iJ_y)}_{I_{\pm}^+}$$

$$T_{3\pm 2} \propto J_z J_{\pm}^2$$

$$T_{3\pm 3} \propto J_{\pm}^3$$

A sűrűségmátrix általános tulajdonságai feltételeket szabnak ki a multipólus paraméterekre. Mivel ϱ hermitikus (2.14) miatt:

$$t_{LM} = (-)^M t_{L-M} \quad (2.18)$$

Ezért $t_{LM} (2j+1)^2$ valós számot jelent, amely teljesen meghatározza ϱ -t.

(2.18)-ból nyilvánvaló, hogy a t_{LO} paraméterek valóságosak. A $Tr(\varrho) = 1$ feltétel és a (2.16)-os egyenlet a

$$t_{00} = Tr\varrho = 1 \quad (2.19)$$

egyenletre vezet.

A $Tr(\varrho) = 1$ és a sűrűségmátrix $\varrho_{kk} \geq 0$ tulajdonságából (2.6) és (2.7) egyenlet, kapjuk a következő feltételt:

$$(2j+1)^{-1} \leq Tr\varrho^2 \leq 1 \quad (2.20)$$

Ezt a következőképpen láthatjuk be [12]:

Diagonizáljuk ϱ -t. A (2.6) és (2.7) feltétel miatt $Tr\varrho^2$ -nek maximuma van, amikor csak egy sajátértéke van és ez 1-gyel egyenlő, akkor ϱ teljesen polarizált állapotot ír le, és $Tr\varrho^2 = 1$. $Tr\varrho^2$ -nek minimuma van, amikor minden sajátérték egyenlő $(2j+1)^{-1}$ -el, ekkor ϱ teljesen polarizálatlan állapotot ír le, és ekkor $Tr\varrho^2 = (2j+1)^{-1}$.

A (2.11), (2.14), (2.15), (2.16) és (2.18)-as formulák segítségével $Tr\varrho^2$ -t kifejezhetjük a t_{LM} paraméterek függvényeként. (2.20)-ból kapjuk, hogy

$$(2j+1)^{-1} \leq (2j+1)^{-1} \sum_{LM} (2L+1) |t_{LM}|^2 \leq 1 \quad (2.21)$$

A (2.5) és (2.6)-os egyenleteket figyelembe véve ϱ -t legfeljebb n számú valós paraméter meghatározza, ahol

$$n = 2(2j+1)^2 - (2j+1)^2 - 1 = (2j+1)^2 - 1$$

pl.:

$$j = \frac{1}{2} \text{-re } n = 3, \quad j = \frac{3}{2} \text{-re } n = 15$$

ami azonban igen nagy szám, tehát minden további megszorítás igen hasznos. Nézzük meg, mit ad a (2.7)-es egyenlet. Látni fogjuk, hogy $j = \frac{1}{2}$ részecskék esetén a (2.7)-es egyenlet egyedül csak a (2.20)-as vagy a (2.21)-es feltételt szabja ki a sűrűségmátrixra $j > \frac{1}{2}$ esetén azonban (2.7)-es további feltételeket ró ki a sűrűségmátrixra és a multipólus paraméterekre. Legyen ϱ $n \times n$ -es hermitikus mátrix, továbbá legyen a szekuláris egyenletre $\Delta(\lambda) = \det(\lambda I - \varrho)$

$$\Delta(\lambda) = \lambda^n - c_1 \lambda^{n-1} + \dots + c_k \lambda^{n-k} (-)^k + \dots + c_n (-)^n = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) \dots (\lambda - \lambda_n) \quad (2.22)$$

$\lambda_1 \dots \lambda_k$ a mátrix sajátértékei és

$$\begin{aligned} C_1 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i = Tr\varrho \\ C_2 &= \sum_{i_1 i_2} \lambda_{i_1} \lambda_{i_2} \\ &\vdots \\ C_l &= \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_l} \lambda_{i_1} \lambda_{i_2} \dots \lambda_{i_l} \\ C_n &= \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n = \det(\varrho) \end{aligned}$$

Egy egyszerű mátrixelméleti tétel szerint [11] az együtthatókat megkaphatjuk, az $S_k \equiv \text{Tr} \varrho^k$ függvényeként:

$$C_l = (-)^{l+1} l^{-1} (S_l - C_1 S_{l+1} + \dots + (-)^k C_k S_{l-k} + \dots + (-)^{l-1} C_{l-1} S_1) \quad (2.23)$$

(2.23) ismételt alkalmazásával kaphatjuk:

$$2C_2 = -S_2 + (S_1)^2$$

$$6C_3 = 2S_3 - 3S_2 S_1 + (S_1)^3$$

$$24C_4 = -6S_4 + 8S_3 S_1 + 3(S_2)^2 - 6S_2 (S_1)^2 + (S_1)^4 \quad \text{stb.}$$

Definíció szerint egy hermitikus mátrix pozitív, ha sajátértékei nem negatívak. A gyökök és együtthatók közötti formulából könnyen belátható a szükséges és elégséges feltétel ahhoz, hogy ϱ pozitív legyen az, hogy szekuláris egyenletének C_l együtthatói pozitívek legyenek [12]

$$\varrho \text{ pozitív} \Leftrightarrow C_l \geq 0 \quad (2.24)$$

(2.23) segítségével (2.24) feltételeket ró ki S_k -re. Egy n dimenziós pozitív hermitikus ϱ mátrix ($\text{Tr} \varrho = 1$ feltétellel) $n-1$ db egyenlőtlenséget elégít ki:

$j \quad n$ pozitivitási feltételek:

$$\frac{1}{2} \quad 2 \quad -S_2 + 1 \geq 0$$

$$1 \quad 3 \quad 2S_3 - 3S_2 + 1 \geq 0$$

$$\frac{3}{2} \quad 4 \quad -6S_4 + 8S_3 + 3(S_2)^2 - 6S_2 + 1 \geq 0$$

Innen az első már megkapott (2.20)-as egyenlőtlenség. Látjuk, hogy $n > \frac{1}{2}$, azaz

$j > \frac{1}{2}$ esetén ϱ pozitivitása (2.7-es egyenlet) további feltételeket is kiró.

Egy másik megszorítást ad az Eberhard—Good tétel egy kiterjesztése. Ha ϱ N db tiszta állapot keverékét írja le és $N < 2j + 1$, akkor ϱ rangja legfeljebb N , vagy más szavakkal ϱ -nak legfeljebb N nem nulla sajátértéke van. Így a szekuláris egyenlet $n - N$ gyöke egyenlő 0-val, azaz ha [12] ϱ rangja N , akkor

$$N \neq 0 = C_n = C_{n-1} = \dots C_{n+1} \quad (2.25)$$

(2.23) segítségével ezeket a feltételeket kifejezhetjük S_k -kal.

A (2.20)-as egyenletnél láttuk, hogy amikor a mátrix rangja $N(N < 2j + 1) \text{Tr} \varrho^2$ a minimumot éri el, amikor az N db nem 0 sajátérték egyenlő N^{-1} -gyel és a minimum N^{-1} , így

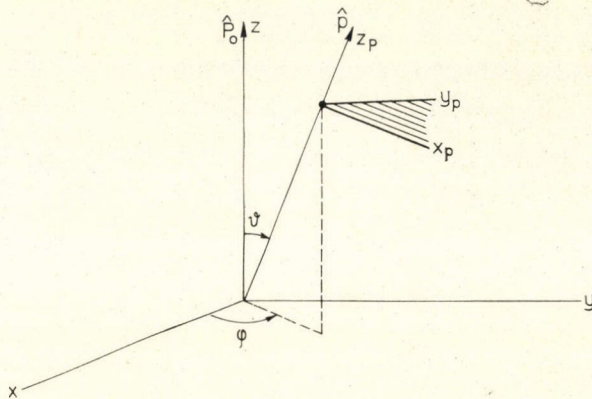
$$\varrho \text{ rangja } N \Rightarrow \text{Tr} \varrho^2 \geq N^{-1} \quad (2.26)$$

(2.26)-os egyenlet nyilván nagyobb alsó határt ad, mint a (2.20)-as egyenlet. Azonban meg kell jegyezni, hogy csak egyik irányban igaz. Így a (2.26)-os feltétel kisebb megkötést tartalmaz, mint a (2.25)-ös feltétel sereg és nem fejezi ki teljesen az Eberhard—Good-tételben foglalt információt [12].

3. Két-test bomlások. Paritást őrző két-test bomlások

A $\gamma \rightarrow \alpha + \beta$ bomlásnál jelöljük a spineket és a paritásokat rendre $j S_\alpha S_\beta$ és $\eta_j \eta_\alpha \eta_\beta$ -val. Az α és β impulzusa a γ nyugalmi rendszerében* \vec{P} és $-\vec{P}$, λ_α , λ_β a helicitások ugyanitt.

$$\hat{P} = \frac{\vec{P}}{|\vec{P}|}$$



1. ábra

$|\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle$ a két részecske állapotvektora, amelyben kiírtuk az impulzus és helicitás kvantumszámokat. Az elforgatás esetén az állapot

$$|\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle = R|\hat{P}_0\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle \quad (3.1)$$

szerint transzformálódik, A $|\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle$ síkhullám állapotokat ki lehet fejteni impulzus momentum állapotok szerint.

$$|\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle = \sum_{j,m} |jm\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} D_{m\lambda}^j(\varphi, \vartheta, 0) \quad (3.2)$$

ahol $\lambda = \lambda_\alpha - \lambda_\beta$ és $D_{m\lambda}^j(\varphi, \vartheta, 0)$ az $R(\varphi, \vartheta, 0)$ „j”-ed rendű irreducibilis reprezentációjának m, λ eleme. Ha P a paritásoperátor, akkor [10]:

$$P|jm\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle = \eta_\alpha\eta_\beta(-)^{j-S_\alpha-S_\beta}|jm-\lambda_\alpha-\lambda_\beta\rangle \quad (3.3)$$

A $\gamma \rightarrow \alpha + \beta$ bomlás amplitúdója (a konkrét alakjától és az energia függésétől most eltekintünk) egy meghatározott $|jm\rangle$ állapot és $|\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta\rangle$ állapot mátrixeleme.

$$Am(\hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta) = \langle \hat{P}\lambda_\alpha\lambda_\beta | U | jm \rangle$$

* A γ nyugalmi rendszerében a koordináta tengelyeket a keletkezését leíró folyamat határozza meg. A z tengely merőleges a keletkezési síkra.

ahol U olyan operátor, amely forgatással és tértükrözéssel szemben invariáns; a paritásértésről később lesz szó. (3.2) segítségével kapjuk

$$Am(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \langle jm\lambda_\alpha\lambda_\beta | U | jm \rangle D_{m\lambda}^{j*}(\varphi, \vartheta, 0) \quad (3.4)$$

Mivel „ U ” forgatással szemben skalár, mátrix elemei nem függnének „ m ”-től — a Wigner—Eckart-tétel szerint — csak λ_α és λ_β -től. Hogy ezt a jelölésben is világosan kifejezzük, írjuk, hogy $\langle jm\lambda_\alpha\lambda_\beta | U | jm \rangle \equiv M(\lambda_\alpha\lambda_\beta)$, tehát az $Am(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta)$ amplitúdót faktorizáltuk egy, a dinamikát tartalmazó tényezőre $[M(\lambda_\alpha\lambda_\beta)]$ és egy kinematikát hordozó tényezőre. A paritásmegmaradás miatt (3.3)-ból következik, hogy [10]

$$M(-\lambda_\alpha - \lambda_\beta) = \eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-S_\alpha-S_\beta} M(\lambda_\alpha\lambda_\beta) \quad (3.5)$$

Egy tiszta állapotra (határozott $|jm\rangle$) a (ϑ, φ) szögeloszlást nyilván akkor kapjuk meg, ha felösszegezzük a helicitásokra és képezzük az amplitúdó abszolút értékének négyzetét (normalizációtól eltekintve):

$$\sum_{\lambda_\alpha\lambda_\beta} Am(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta) A_m^*(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta)$$

Ha a γ bomlás egy $|jm\rangle$ kevert állapotból (melyet a $\varrho_{mm'}$ jellemez) történik, akkor a szögeloszlás nyilván

$$W(\vartheta, \varphi) = \text{Tr}(1\varrho) = N \sum_{mm'} \sum_{\lambda_\alpha\lambda_\beta} A_m(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta) \varrho_{mm'} A_m^*(\hat{p}\lambda_\alpha\lambda_\beta) \quad (3.6)$$

vagy 3.4-et beírva

$$W(\vartheta, \varphi) = N' \sum_{mm'} \sum_{\lambda_\alpha\lambda_\beta} |M(\lambda_\alpha\lambda_\beta)|^2 D_{m\lambda}^{j*} D_{m\lambda}^j(\varphi, \vartheta, 0) \varrho_{mm'} \quad (3.7)$$

Szokásos még bevezetni a

$$Z_{mm'}^{j\lambda\pm}(\vartheta) = d_{m\lambda}^j(\vartheta) d_{m'-\lambda}^j(\vartheta) \pm d_{m-\lambda}^j(\vartheta) d_{m'-\lambda}^j(\vartheta) \quad (3.8)$$

jelölést is [13]. A Z függvények szimmetrikusak m és m' -ben. Ezt felhasználva

$$W(\vartheta, \varphi) = N' \sum_{\substack{\lambda_\alpha \equiv 0, \lambda_\beta \\ m, m'}} |M(\lambda_\alpha\lambda_\beta)|^2 Z_{mm'}^{j\lambda+}(\vartheta) (\text{Re}[\varrho_{mm'} e^{i(m-m')\varphi}]) \quad (3.9)$$

Pl.: $j_\gamma = \frac{3}{2} \quad j_\alpha = \frac{1}{2} \quad j_\beta = 0$ esetén

a normalizált szögeloszlás

$$W_{\frac{3}{2}}(\vartheta, \varphi) = \frac{3}{4\pi} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} + \cos^2 \vartheta \right) (\varrho_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \varrho_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta (\varrho_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} + \varrho_{-\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}) - \frac{1}{\sqrt{3}} \sin 2\vartheta \text{Re}(\varrho_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} e^{i\varphi} - \varrho_{-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} e^{-i\varphi}) - \frac{1}{\sqrt{3}} \sin^2 \vartheta \text{Re}(\varrho_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} e^{2i\varphi} + \varrho_{-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} e^{-2i\varphi}) \right\} \quad (3.10)$$

További egyszerűsödés lép fel, ha abban a folyamatban, ahol a γ keletkezett, a paritás megmarad, és ha a kvantálási tengelyt megfelelően választjuk. Tegyük fel, hogy γ két részecske ütközésnél keletkezett és a kölcsönhatásban résztvevő másik három részecske spinjét nem mérték. Ekkor, ha a kvantálási tengelyt a keletkezési síkban választjuk, ez a mátrixelemekre a következő megszorítást rója ki [14]

$$Q_{mm'} = (-) Q_{-m-m'} \quad \text{és így} \quad t_{LM}^* = (-)^L t_{LM} \quad (3.11)$$

és ha a kvantálási tengely a keletkezési síkra merőleges:

$$Q_{mm'} = 0$$

ha $m - m'$ páratlan és így $t_{LM} = 0$, ha M páratlan. Ha a Z tengely merőleges a keletkezési síkra, akkor a $\sin 2\vartheta$ tag nem szerepel. Két D függvény szorzatának ismert redukcióját, valamint t_{LM} definícióját felhasználva kapjuk

$$W(\vartheta, \varphi) = N'' \sum_{\substack{\lambda_x \lambda_\beta \\ LM}} |M(\lambda_x \lambda_\beta)|^2 (-)^{j-\lambda} \langle L, 0 | j, j; \lambda, -\lambda \rangle t_{LM}^* Y_{LM}(\vartheta, \varphi) \quad (3.13)$$

$$\text{mert} \quad D_{M0}^L = \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_{LM}^* \quad \text{és} \quad N'' = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \left[\sum_{\lambda_x \lambda_\beta} |M(\lambda_x \lambda_\beta)|^2 \right]^{-1}$$

vagy másképpen

$$\langle Y_{LM} \rangle = \int d\Omega W(\vartheta, \varphi) Y_{LM}(\vartheta, \varphi) = t_{LM} \left\{ N'' \sum_{\lambda_x \lambda_\beta} |M(\lambda_x \lambda_\beta)|^2 (-)^{j-\lambda} \langle L, 0 | j, j; \lambda, -\lambda \rangle \right\} \quad (3.14)$$

A paritás megmaradás és a ($Z \perp$ produkciós síkra) $t_{LM} = 0$, ha M páratlan, feltételek miatt

$$\text{pl.:} \quad j_\gamma = \frac{3}{2}, \quad j_z = \frac{1}{2}, \quad j_\beta = 0 \quad \text{esetén} \quad \left| M\left(\frac{1}{2} \ 0\right) \right|^2 = \left| M\left(-\frac{1}{2} \ 0\right) \right|^2$$

$$\langle Y_{LM} \rangle = \begin{cases} n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páros} \\ 0 & \text{ha } L \text{ páratlan} \end{cases}$$

$$\langle Y_{00} \rangle = n_{00} t_{00}^*$$

$$\langle Y_{1M} \rangle = 0 \quad \langle Y_{3M} \rangle = 0 \quad \langle Y_{2\pm 2} \rangle = n_{20} t_{22}^+$$

$$\langle Y_{2\pm 1} \rangle = 0 \quad \langle Y_{2,0} \rangle = n_{20} t_{20}^*$$

$$\text{itt} \quad n_{L0} \equiv (-)^{j-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \left\langle j, j; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| L, 0 \right\rangle$$

Polarizációk

Az egyszerűség kedvéért nézzük a $J_\gamma = \frac{3}{2}$ $J_z = \frac{1}{2}$ $J_\beta = 0$ esetet. Egy Lorentz transzformációval áttérünk α nyugalmi rendszerébe, ahol a spin iránynak egyértelmű jelentése van. A $|\hat{P} \lambda_x \lambda_\beta\rangle$ állapotok egy λ -tól független normalizációs faktortól

eltekintve a $|\frac{1}{2}\lambda\rangle$ spin állapotokba mennek át ($\lambda = \lambda_\alpha - \lambda_\beta = \lambda_\alpha$) az (x_p, y_p, z_p) rendszerben Z_p -vel (1. ábra), mint kvantálási iránnyal [8]. Ebben a rendszerben $\varrho(\alpha)$ -t könnyű megkapni.

„ α ” polarizációja:

$$\bar{P}(\vartheta, \varphi) = \langle \bar{\sigma} \rangle = \frac{\text{Tr}[\varrho(\alpha) \bar{\sigma}]}{\text{Tr}\varrho(\alpha)} \quad (3.15)$$

de

$$\text{Tr}\varrho(\alpha) = W(\vartheta, \varphi)$$

tehát

$$W(\vartheta, \varphi) \bar{P}(\vartheta, \varphi) = \text{Tr}[\varrho(\alpha) \bar{\sigma}]$$

$\varrho(\alpha)$ -t már akkor előállítottuk, amikor a szögeloszlást számoltuk, de akkor felösszegeztünk a végállapot helicitásaira.

Longitudinális polarizáció

Ha „ α ” helicitása „ λ ”, akkor α eloszlása λ helicitás állapot mellett nyilván

$$W_\lambda(\vartheta, \varphi) = N' |M|^2 \sum_{mm'} D_{m\lambda}^{j*}(\vartheta, \varphi, 0) \varrho_{mm'} D_{m'\lambda}^j(\vartheta, \varphi, 0) \quad (3.16)$$

A longitudinális polarizáció eloszlása nyilván

$$P_l(\vartheta, \varphi) = \frac{W_{\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) - W_{-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi)}{W_{\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) + W_{-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi)} \quad (3.17)$$

Mivel a nevező éppen $W(\vartheta, \varphi)$, a Z függvényt ismét bevezetve, kapjuk:

$$P_l(\vartheta, \varphi) W(\vartheta, \varphi) = N' |M|^2 \sum_{mm'} Z_{mm'}^{j\frac{1}{2}}(\vartheta) \varrho_{mm'} e^{i(m-m')\varphi} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} P_l(\vartheta, \varphi) W(\vartheta, \varphi) = & \frac{3}{4\pi} \left\{ \left[\frac{1}{2} (\varrho_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - \varrho_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}) \left(3 \cos^2 \vartheta - \frac{5}{3} \right) + \right. \right. \\ & + \frac{1}{2} (\varrho_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} - \varrho_{-\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}) \sin^2 \vartheta \left. \right] \cos \vartheta + \left[\frac{1}{\sqrt{3}} (1 - 3 \cos^2 \vartheta) \text{Re} (\varrho_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} e^{i\varphi} + \varrho_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} e^{-i\varphi}) + \right. \\ & + 3 \left(\cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \text{Re} (\varrho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} e^{i\varphi}) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin 2\vartheta \text{Re} (\varrho_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} e^{2i\varphi} - \varrho_{-\frac{3}{2}\frac{1}{2}} e^{-2i\varphi}) - \\ & \left. \left. - \sin^2 \vartheta \text{Re} (\varrho_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} e^{3i\varphi}) \right] \sin \vartheta \right\} \quad (3.19) \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy ez a kifejezés tartalmaz olyan elemeket, melyet a szögeloszlás (3.10) nem tartalmazott. (Ezeket aláhúzással jelöltük.) Ha Z-t a keltési síkra merőlegesen vesszük fel, akkor az aláhúzott tagok nullák, és így ϱ -nak csak olyan elemeit lehet meghatározni, amelyek a szögeloszlásban is szerepelnek.

Ha most újra multipólus momentumokra térünk át:

$$\langle P_l Y_{LM} \rangle = \int d\Omega W(\vartheta, \varphi) P_l(\vartheta, \varphi) Y_{LM}(\vartheta, \varphi) = \begin{cases} n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páratlan} \\ 0 & \text{ha } L \text{ páros} \end{cases} \quad (3.20)$$

amelyekből a t_{LM} -ek meghatározhatók.

Transzverzális polarizáció

Itt észre kell venni, hogy σ_x és σ_y -nek a diagonális elemei nullák, ezért a transzverzális komponensek szükségképpen $M(\frac{1}{2})M^*(-\frac{1}{2})$ és $M(-\frac{1}{2})M^*(\frac{1}{2})$ tagokat tartalmaznak, ahol fontos a relatív fázis. Bevezetve a

$$\mu = \frac{M^*(\frac{1}{2})M(-\frac{1}{2}) + M(\frac{1}{2})M^*(-\frac{1}{2})}{|M(\frac{1}{2})|^2 + |M(-\frac{1}{2})|^2} = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \quad (3.21)$$

paramétert, valamint a polarizáció szférikus komponenseit

$$P^{\pm 1} = \mp (P_x \pm iP_y)/\sqrt{2}, \quad P^0 = P_z \quad (3.22)$$

és a szférikus polarizáció momentumait

$$\langle P^v Y_{LM} \rangle = \int d\Omega W(\vartheta, \varphi) P^v(\vartheta, \varphi) Y_{LM}(\vartheta, \varphi) \quad (3.23)$$

Páratlan L -re kapjuk

$$\begin{aligned} \mu(2j+1)n_{L0}t_{LM} &= (L+1) \sqrt{\frac{L}{2L+1}} \sum_{v=-1}^1 \langle P^v Y_{L-1, M-v} \rangle \\ &\langle 1, L-1; v, M-v | L, M \rangle + L \sqrt{\frac{L+1}{2L+1}} \sum_{v=-1}^1 \langle P^v Y_{L+1, M-v} \rangle \\ &\langle 1, L+1; v, M-v | L, M \rangle \end{aligned} \quad (3.24)$$

v. a derékszögű polarizációs komponensekkel

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} P_{\perp x} \\ P_{\perp y} \end{Bmatrix} W(\vartheta, \varphi) &= -\eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \begin{Bmatrix} \text{Re} \\ -\text{Im} \end{Bmatrix} \sum_{LM} \left\langle L, 1 \left| j, j; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right. \right\rangle \\ &t_{LM}^* \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} D_{M1}^{L*}(\varphi, \vartheta, 0) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Ha γ polarizációja olyan, hogy $t_{L0} \neq 0$,

$$\text{akkor} \quad \frac{\langle P_l W Y_{L0} \rangle}{\langle P_{\perp x} W e^{-i\varphi} Y_{L1} \rangle} = \eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{L(L+1)}}{2j+1} \quad (3.26)$$

Ezek után összefoglaljuk a spin-paritás meghatározás menetét paritásőrző két-test bomlásban. Az alábbi három eloszlást lehet felhasználni

- (A) $n_{L0}t_{LM}$ L páros, szögeloszlásból
- (B) $n_{L0}t_{LM}$ L páratlan, longitudinális polarizációból
- (C) $\mu(2j+1)n_{L0}t_{LM}$ L páratlan, transzverzális polarizációból.

Az (A), (B), (C)-ket kísérletileg meg lehet határozni. „ J ” egy adott választására az n_{L0} oefficiensek kiszámíthatók, és lehet látni, hogy a t_{LM} -ek $L > 2j$ -re statisztikusan szignifikánsan konzisztensek-e 0-val, és $L < 2j$ -re kielégítik-e azokat a korlátozásokat, amelyekről már korábban szó volt.

A (B) és (C) összehasonlítása ugyanannál a páratlan L -nél egy másik ellenőrzési lehetősége „ j ”-re tett hipotézisnek és a paritásnak.

A fenti eljárást végrehajthatjuk minden olyan kísérletnél, amely megadja t_{LM} -ek teljes rendszerét. (Pl. egy olyan kísérlet, ahol csak az α -nak a szögeloszlását nézzük, nyilván nem elegendő.) Mivel bizonyos kísérleti körülmények között előfordulhat, hogy t_{LM} nagyon kicsi a maximálisan megengedett $2J$ alatt, ezért ez az eljárás valószínűleg J -re csak egy alsó határt szab meg. Ezért ajánlatos a kísérletet különböző energia tartományokban és a lehetséges különböző keltési reakciókkal megismételni, abban a reményben, hogy ezen kísérletek valamelyikében a $\varrho(\alpha)$ a teljes megengedett bonyolultságában kialakul.

Végül fontos tisztázni a nem rezonáns háttér hatását, különösen, ha az nagy. Ez ti. el tudja torzítani mind a rezonancia-csúcs alakját, mind a szögeloszlást, és így előre-hátra aszimmetriát mutat (pl. páratlan L -k jelennek meg a szögeloszlásban). Fontos, hogy ezek a torzítások kicsik legyenek. Ha hibát is szeretnénk számolni, jobb a direkt mérhető mennyiségek eloszlását vizsgálni különböző „ j ” és „ q ” hipotézisek mellett.

A paritás-sértés hatása

Ilyenkor U felbomlik két tagra: $U_s + U_p$, azaz egy skalár és egy pszeudoskalár tag összegére, ahol [14]

$$PU_sP^{-1} = U_s; \quad PU_pP^{-1} = -U_p \quad (3.27)$$

Ennek következtében a matrix elem

$$M(\lambda_\alpha \lambda_\beta) = M_s + M_p \text{-re bomlik fel.} \quad (3.28)$$

$$M_s(-\lambda_\alpha - \lambda_\beta) = \eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-S_\alpha-S_\beta} M_s(\lambda_\alpha \lambda_\beta) \quad (3.29)$$

$$M_p(-\lambda_\alpha - \lambda_\beta) = (-1) \eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-S_\alpha-S_\beta} M_p(\lambda_\alpha \lambda_\beta) \quad (3.30)$$

Szorítkozzunk újra az $S_\alpha = \frac{1}{2}$, $S_\beta = 0$ esetre. Ekkor a különböző eloszlások a következő M kombinációkat tartalmazzák:

$$\alpha \equiv \frac{2\text{Re}(M_s M_p^*)}{|M_s|^2 + |M_p|^2}; \quad \beta \equiv \frac{2\text{Im}(M_s M_p^*)}{|M_s|^2 + |M_p|^2}; \quad \gamma \equiv \frac{|M_s|^2 - |M_p|^2}{|M_s|^2 + |M_p|^2}$$

Ellenőrizhető, hogy $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$. Egyes szerzők β és γ -t még egy $(-)^{j-\frac{1}{2}-l}$ faktorról szorozzák, ahol l definíciója: $(-)^l = \eta_\alpha \eta_\beta \eta_\gamma$. Ezekkel a jelölésekkel a szög-eloszlás:

$$W(\vartheta, \varphi) = (-)^{j-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{LM} \left\langle L, 0 \middle| j, j; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle t_{LM}^* Y_{LM} \left[\frac{1}{2} (1 + (-)^l) + \frac{\alpha}{2} (1 - (-)^l) \right] \quad (3.31)$$

vagy másképpen:

$$\begin{aligned} \langle Y_{LM} \rangle &= n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páros és} \\ \langle Y_{LM} \rangle &= \alpha n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páratlan} \end{aligned}$$

A longitudinális polarizáció pedig:

$$P_l(\vartheta, \varphi)W(\vartheta, \varphi) =$$

$$= (-)^{j-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{LM} \left\langle L, 0 \middle| j, j; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle t_{LM}^* Y_{LM} \left[\frac{1}{2} (1 - (-)^L) + \frac{\alpha}{2} (1 + (-)^L) \right]$$
(3.32)

vagy másképpen:

$$\begin{aligned} \langle P_l Y_{LM} \rangle &= n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páratlan és} \\ \langle P_l Y_{LM} \rangle &= \alpha n_{L0} t_{LM} & \text{ha } L \text{ páros.} \end{aligned}$$

A $\begin{cases} P_{\perp x} \rightarrow \gamma P_{\perp x} + \beta P_{\perp x} \\ P_{\perp y} \rightarrow \gamma P_{\perp y} - \beta P_{\perp y} \end{cases}$ helyettesítést elvégezve az előbbi transzverzális polarizáció képletei helyesek maradnak [14].

A különböző lehetőségek a momentum analízisre analógok a fentebb tárgyaltakkal.

Ha $t_{L0} \neq 0$ és L páratlan, akkor

$$\frac{\langle W Y_{L0} \rangle}{\langle P_l W Y_{L0} \rangle} = \alpha \quad (3.33)$$

$$\frac{\langle P_{\perp x} W e^{-i\varphi} Y_{L1} \rangle}{\langle P_l W Y_{L0} \rangle} = \gamma \eta_x \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-\frac{1}{2}} \frac{(2j+1)}{\sqrt{L(L+1)}} \quad (3.34)$$

$$\frac{\langle P_{\perp y} W e^{-i\varphi} Y_{L1} \rangle}{\langle P_l W Y_{L0} \rangle} = -\beta \eta_x \eta_\beta \eta_\gamma (-)^{j-\frac{1}{2}} \frac{(2j+1)}{\sqrt{L(L+1)}} \quad (3.35)$$

ha $t_{L0} \neq 0$ felhasználva a $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$ összefüggést kapjuk, hogy

$$(2j+1)^2 = L(L+1) \frac{\langle P_{\perp x} W e^{-i\varphi} Y_{L1} \rangle^2 + \langle P_{\perp y} W e^{-i\varphi} Y_{L1} \rangle^2}{\langle P_l W Y_{L0} \rangle^2 - \langle W Y_{L0} \rangle^2} \quad (3.36)$$

j -nek ezt a meghatározási módját eddig $L=1$ esetében használták csak.

4. Háromtest bomlások

Mint ahogy az jól ismert, ha egy részecske három másikra bomlik, akkor a Dalitz diagramon a végállapotot jellemző pontok eloszlásából nyerhetünk a részecske spinjére és paritására vonatkozó információkat [15]. A klasszikus példa erre az ω mezon 3π -re történő bomlása. Komplementer információk nyerhetők a bomlási sík normálisának vagy valamelyik bomlástermék impulzusának eloszlásából. Ez az utóbbi kapcsolódik a kéttest bomlásokról elmondottakhoz (ahol a Dalitz-diagramnak nincs megfelelője, mivel a négyes impulzus megmaradása rögzíti az összes változókat).

A $\gamma \rightarrow 1 \ 2 \ 3$ átmenet valószínűsége:

$$dw = \frac{(2\pi)^4}{2W} |m|^2 \frac{d^3 \bar{p}_1 d^3 \bar{p}_2 d^3 \bar{p}_3}{(2\pi)^9 (2E_1)(2E_2)(2E_3)} \delta^4(p_1 + p_2 + p_3 - P) \quad (4.1)$$

ahol P és W a γ négyes impulzusa, illetve energiája, m az átmenet amplitúdója. 5 független változó van, ha P le van rögzítve. Pl. a γ nyugalmi rendszerében

$$dw = \frac{1}{(4\pi)^3 m_\gamma} |m|^2 dE_1 dE_2 \frac{d^3\Omega}{8\pi^2} \quad (4.2)$$

ahol $d\Omega = d\alpha d(\cos\beta)d\gamma$ az elemi térszög és $0 \leq \alpha \leq 2\pi$; $0 \leq \beta \leq \pi$; $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ α és β megadja a bomlási sík normálisának irányát, γ pedig az impulzus háromszög helyzetét a síkban. (4.2)-ben az m általában mind az öt változótól függ, de rögzített α , β , γ mellett a Dalitz-diagram populációja tanulmányozható, vagy fordítva E_1 és E_2 szerint az integrálást elvégezve a térszög eloszlást kapjuk.

Ezek után hasonlóan járunk el, mint a két test bomlásánál; bevezetjük a helicitás állapotokat és a D függvényeket.

A standard orientációja a $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 = 0$ impulzus háromszögnek:

$\vec{p}_1 \parallel x$ és $p_{2y} > 0$. Ebből következik, hogy $\vec{p}_1 \times \vec{p}_2 \parallel z$.

Rögzített E_1, E_2, E_3 esetén a nagysága és alakja a háromszögnek rögzített. $\vec{P}_i^{(0)}$ -val jelöljük az impulzusokat a standard orientációban. A jelenlevő állapotok akkor $|E_i \vec{P}_i^{(0)} \lambda_i\rangle$ -ből forgatással nyerhetők $[\varphi_i$ és ϑ_i alkalmas megválasztásával pl.:

$\varphi_1 = 0, \vartheta_1 = \frac{\pi}{2}$], tehát egy állapot, mely tetszőleges háromszög orientációt reprezentál

$$|E_1 \lambda_1, E_2 \lambda_2, E_3 \lambda_3; \alpha\beta\gamma\rangle = R(\alpha\beta\gamma) |E_1 \hat{P}_1^{(0)} \lambda_1\rangle |E_2 \hat{P}_2^{(0)} \lambda_2\rangle |E_3 \hat{P}_3^{(0)} \lambda_3\rangle \quad (4.3)$$

Az energiák és a helicitások a forgatással nem változnak, (α, β) az \vec{n} normális irány-szögei, míg γ azimut szög a Δ helyzetét jellemzi a síkban.

Egy határozott impulzus momentumú állapotot (4.3)-ból

$|E_i \lambda_i; jmk\rangle = N_j \int d\alpha d(\cos\beta) d\gamma D_{mk}^{j*}(\alpha, \beta, \gamma) |E_i \lambda_i; \alpha\beta\gamma\rangle$ -val nyerünk

$$N_j = \frac{\sqrt{j + \frac{1}{2}}}{2\pi} \quad m = jz \quad k = j\vec{n} \quad (4.4)$$

Az inverz összefüggés

$$|E_i \lambda_i; \alpha\beta\gamma\rangle = \sum_{jmk} |E_i \lambda_i; jmk\rangle N_j D_{mk}^j(\alpha\beta\gamma) \quad (4.5)$$

A bomlási amplitúdó egy határozott jm kezdeti állapotból az $E_i, \lambda_i, \alpha\beta\gamma$ állapotba való átmenet esetén

$$A_m(E_i \lambda_i, \alpha\beta\gamma) = \langle E_i \lambda_i; \alpha\beta\gamma | U | jm \rangle \quad (4.6)$$

Ahol U újra skalár rotációval és tér tükrözéssel szemben, ha a paritás megmarad. (4.5) segítségével kapjuk:

$$A_m(E_i \lambda_i; \alpha\beta\gamma) = N_j \sum_k \langle E_i \lambda_i; jmk | U | jm \rangle D_{mk}^{j*}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (4.7)$$

A kétféle bomlással összehasonlítva láthatjuk, hogy most minden helicitás kombinációhoz $2j+1$ db amplitúdó tartozik az egy helyett. (A paritás megmaradás

ezt majd korlátozza.) Az amplitúdók most fix szögre és helicitásra nem számok, hanem E_1 és E_2 függvényei. Az impulzus Δ normalizálásának eloszlása:

$$W(\alpha, \beta) = N' \sum_{mm'} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \int dE_1 dE_2 d\gamma A_m \varrho_{mm'} A_m^*$$

Ha (4.7)-et behelyettesítjük és az integrálást elvégezzük

$$W(\alpha, \beta) = N' \sum_{mm'} \sum_k |M_k(\lambda_i)|^2 D_{mk}^{j*}(\alpha\beta) \varrho_{mm'} D_{m'k}^j(\alpha\beta) \quad (4.8)$$

ahol $|M_k(\lambda_i)|^2 = 2\pi \int dE_1 dE_2 |\langle E_i \lambda_i; jmk | U | jm \rangle|^2$

A D függvények szorzatát kiredukálva és alkalmasan normálva kapjuk

$$W(\alpha, \beta) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{LM} A_L t_{LM}^* Y_{LM}(\beta\alpha) \quad (4.9)$$

ahol

$$A_L = \frac{\sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \sum_k (-)^{j-k} \langle L, 0 | j, j; k, -k \rangle |M_k(\lambda_i)|^2}{\sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \sum_k |M_k(\lambda_i)|^2}$$

paritás megmaradás:

$$P|E_i \lambda_i; jmk\rangle = e^{i\pi k} \eta_1 \eta_2 \eta_3 (-)^{S_1 - \lambda_1 + S_2 - \lambda_2 + S_3 - \lambda_3} |E_i - \lambda_i; jmk\rangle \quad (4.10)$$

ha 3 pszeudoskalárra bomlik, akkor

$$P|E_i; jmk\rangle = (-)^{k+1} |E_i; jmk\rangle \quad (4.11)$$

Spin-paritás	Ampl. száma	k értéke
0^+	0	—
$0^-, 1^-$	1	0
$1^+ 2^+$	2	1, -1
$2^- 3^-$	3	2, 0, -2

A $j^P = 1^-(\omega)$ és $j^P = 0^-(\eta)$ csak 1 amplitúdót tartalmaz, tehát azonos a kétfest kifejezéssel. A $j^P = 1^+$ két amplitúdóval írható le $k = \pm 1$

$$\begin{aligned} W_{1^+}(\alpha, \beta) = & \frac{3}{8\pi} \left\{ \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \beta) (\varrho_{11} + \varrho_{-1-1}) + \sin^2 \beta \varrho_{00} + \sin^2 \beta \operatorname{Re} [\varrho_{1-1} e^{2i\alpha}] + \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\beta \operatorname{Re} [(\varrho_{10} - \varrho_{0-1}) e^{i\alpha}] + \\ & \left. + \lambda [\cos \beta (\varrho_{11} - \varrho_{-1-1}) + \sqrt{2} \sin \beta \operatorname{Re} [(\varrho_{10} + \varrho_{0-1}) e^{i\alpha}] \right\} \quad (4.12) \end{aligned}$$

ahol

$$\lambda = \frac{|M_1|^2 - |M_{-1}|^2}{|M_1|^2 + |M_{-1}|^2}$$

A barion polarizáció

Csak egy különösen érdekes példát szeretnénk bemutatni: A barion $+2\pi$ vég-állapot esetét. A normális szögeloszlását (amely nagyon bonyolult kifejezés) meg lehet találni a [13] cikkben. Ha a háromtest bomlásban a paritás megmarad (a γ szög szerint kiintegrálunk, tehát megfigyelhető mennyiségek a normálissal párhuzamosak) a megfelelő helicitás állapotokat a végállapot részecskékre, az előzőek alapján fel lehet írni:

$$|E_i; jmk\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |E_i \frac{1}{2}; jmk\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \eta_{11}(-)^{k-\frac{1}{2}} |E_i - \frac{1}{2}; jmk\rangle \quad (4.13)$$

Ez az állapot egy saját állapota a barion normális irányú spin komponensének $(\bar{\sigma}\bar{n})$ -nek $\eta_{11}(-)^{k-\frac{1}{2}}$ sajátértékkel. Ez annyit jelent, hogy a transzverzális polarizáció (párhuzamos a normálissal) eloszlását (4.8)-ból nyerhetjük azzal az egyszerű helyettesítéssel, hogy beírjuk sajátértékeit a Σ jel alá.

$$P_{\bar{n}}(\alpha\beta)W(\alpha\beta) = N' \sum_{\substack{mm' \\ \lambda k}} \eta_{11}(-)^{k-\frac{1}{2}} |M_k(\lambda)|^2 D_{mk}^{j*}(\alpha\beta) \varrho_{mm'} D_{m'k}^j(\alpha\beta) \quad (4.14)$$

$$P_{\bar{n}}(\alpha\beta)W(\alpha\beta) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{LM} B_L t_{LM}^* Y_{LM}(\beta\alpha)$$

$$B_L = \eta_{11}(-)^{j-\frac{1}{2}} \frac{\sum_{\lambda k} \langle L, 0 | j, j; k, -k \rangle |M_k(\lambda)|^2}{\sum_{\lambda k} |M_k(\lambda)|^2} \quad (4.15)$$

Az ilyen módon a szögeloszlás felhasználásával kapott multipólusok elvileg elegendő információt adnak a multipólus paraméterek teljes meghatározásához. Így tehát teljes spin-paritás analízist lehet csinálni.

IRODALOM

1. R. D. Tripp, Ann. Rev. Nucl. Sci. 15, 325, 1965.
2. N. Byers, S. Fenster, Phys. Rev. Letters, 11, 52, 1963.
3. L. Durand, L. F. Landovitz, J. Leitner, Phys. Rev. 112, 273, 1958.
4. M. Ademollo, R. Gatto, G. Preparata, Phys. Rev. 139, B (1608), 1965.
5. Suh Urk Chung, Phys. Rev. 169, 1342, 1968.
6. U. Fano, Rev. Mod. Phys. 29, 74, 1957.
7. A. R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1957.
8. J. Ashkin in Symmetries in Elementary Particle 1964. International School of Physics „Ettore Majorana” Editor: A. Zichichi.
9. T. D. Lee, C. N. Yang, Phys. Rev. 109, 1755, 1958.
10. M. Jacob, G. C. Wick, Annals of Physics 7, 404, 1959.
11. F. R. Gantmakher, The Theory of Matrices. Chelsea Publishing Company New York 1960. Vol. I. p. 87.
12. P. Minnaert, Phys. Rev. 151, 1306, 1966.
13. S. M. Berman, M. Jacob, Phys. Rev. 139, B 1023, 1965.
14. J. D. Jackson in High Energy Physics, 1965. Gordon and Breach Science Publishers, Inc. New York, 1966.
15. C. Zemach, Phys. Rev. 133 B, 1201, 1964.

KÖNYVISMERTETÉS

R. Klötzler: MEHRDIMENSIONALE VARIATIONSRECHNUNG.

Birkhauser Verlag, Basel und Stuttgart, 1970.

Az egyik klasszikus matematikai diszciplína, a variációszámítás jelenleg másodvirágzását éli. Fejlődésének egyik tanúbizonysága, hogy az utóbbi időben számos különböző kézikönyv anyagát képezi elemi áttekintése vagy valamelyik részletkérdése. A matematika ezen ágának gazdagsága nem engedi meg, hogy csak egyetlen kötet foglalkozzék vele. Klötzler maga is egy speciális területet választ ki, amely szűkebb szakterületéhez és oktatási profiljához áll közel, koncentrálni bizonyos sajátosságok bizonyítására és a variációszámításból folyó sajátérték kritériumokat és vele kapcsolatos térelméleteket tartja szemelőtt. A könyv célja a variációszámítás egyes gyakorlati alkalmazásának bemutatása, konkrét, sok esetben éppen bonyolult voltak miatt elnagyolt feladatok részletes megoldása, sőt felvet még eddig megoldatlan kérdéseket is. Emellett mégis elég általános és egyedi marad, mert szemben a többi eddig megjelent monográfiákkal részletesen foglalkozik a technikailag jelentős variációs kérdések alapjaival, azaz a többszörös integrálok és a mellékfeltételek variációs problémáival. Innen ered a könyv címe is. Tárgyalási módjában egyesíteni törekszik Lagrange, valamint Euler klasszikus módszereit, illetőleg ezek általánosítását és a problémák térelméleti megközelítését. Ezen szellemben ismerteti először a variációs problémák alaptípusait, majd a funkcionálanalízisből vett segédeszközöket, a szélsőértékhez szükséges feltételeket, az első és második variáció elméletét. A térelméleti tárgyaláskor a metodikát tekintve megtartja Charathéodory szellemét, az elegendő kritériumok felépítését, de tőle eltérően a feladatok globális megvitatására törekszik, elsőbbséget biztosít a tisztán analitikus de-Donder—Weyl-féle térfogalomnak. Ez az a fejezet, amelyre a szerző saját munkássága erősen rányomja bélyegét. Ennek köszönhető a térelmélet egy gyakorlati alkalmazásának és ennek a variációszámítás sajátérték kritériumaival való kapcsolatának bemutatása. Egyidejűleg ezen a módon a közönséges és parciális differenciálegyenletek határ- és sajátérték problémái elméletében egy sor új aspektust tár fel, amelyek sokat nyújtanak a szak-analitikusoknak és lehetőséget adnak az ilyen feladatok számbeli tárgyalására.

Hogy ennek a könyvnek a térfogatát elviselhető határok között tartsa, hogy a többdimenziós variációszámítás tulajdonképpen problémájához eljuthasson, a szerző sok funkcionálanalízis és potenciálméleti tényt bizonyítással nélkül közöl. Mellőzi több esetben a megoldások létezésének és analitikai jellegének problémáját. Ezekkel kapcsolatban az utóbbi időben amúgy is számos monográfia jelent meg. A szerző könyvét nem egyedül matematikus hallgatók vagy hivatásos matematikusok számára írta. A technikus fizikusi szakterületen levő hallgatók és tudományos dolgozók közül is számít olvasókra. A könyv megértéséhez éppen ezért a funkcionálanalízis és a variációszámítás elemeinek némi ismerete nagyon hasznos, de nem feltétlenül szükséges. Segítségül szolgál olvasóinak a megadott irodalmi jegyzék, amelyben nemcsak a többdimenziós variációszámítás speciális irodalma szerepel, hanem számos más, ezzel kapcsolatos tankönyv is. (T. Gy.)

ULTRARÖVID LASER-IMPULZUSOK*

KERTÉSZ IVÁN

KFKI Fizikai Optikai Laboratóriuma, Budapest

A laser, rezonátoron belüli, aktív modulációjának leírása után a passzív moduláció két DeMaria-, illetve Fleck—Letohov-féle elméleti interpretációját, és az utóbbit igazoló néhány kísérletet ismerteti az I., II. és III. rész. A. IV. rész a módus szinkronizáció kísérleti előállításával és az ultrarövid (10^{-12} sec) impulzusok mérésével foglalkozik.

1. Bevezetés

A tér és időbeli koherencia, valamint a nagy intenzitás a laserek olyan tulajdonságai, melyek ötletek egész sorát indukálták, s ily módon létrehozták a „nem-lineáris optiká”-t. Az ötletek azonban mind nagyobb és nagyobb teljesítményt igényeltek a szilárdtest laserektől, így a normál üzemmódot [1] ($10\text{--}100\text{ kW}$) felváltotta a Q -kapcsolás ([2] óriás impulzus: $1\text{--}500\text{ MW}$), az utóbbi időben pedig egyre nagyobb tért hódít a mode-locking technika [11], melynek segítségével a teljesítmény GW fölé nő (erősítővel már $10^{12}\text{--}10^{13}\text{ W}$ -ot is elértek [3]). A módus-szinkronizáció eredményeképpen 10^{-12} sec-os impulzusok állnak rendelkezésünkre, mely a kölcsönhatások többségében $\delta(t)$ -függvényszerű gerjesztést tesz lehetővé.

Magyar nyelvű irodalom mindaddig csak a normál és a giant-üzemmódról van [4], a módusszinkronizációról csupán rövid ismertetés jelent meg, egy-egy mérés kapcsán, melyben az ultrarövid impulzust szolgáltató laser „csak” fényforrásként szerepelt [5, 6].

Az első részben a laser rezonátorba helyezett aktív modulátor hatását követjük nyomon — stacionárius esetben —, s így meglátjuk, hogy hogyan képes a megfelelő frekvenciájú moduláció szinkronizálni módusainkat.

A második rész a módusok véletlen összelebegtetésének hatására változó transzmissziójú passzív modulátor szinkronizáló, illetve impulzushossz csökkentő szerepét írja le.

A harmadik rész a spontán emisszió fluktuációiból indul ki és kimutatja, hogy az az impulzus nő több nagyságrenddel a többi fölé, melyben a rezonátor saját-frekvenciájával egyező frekvenciájú elektromágneses hullámok „véletlenül” megfelelő fázisban szuperponálódtak. A passzív Q -kapcsoló itt is mint alulvágó szűrő szerepel.

Az utolsó részben a mode-locking kísérleti előállításakor felmerülő problémákat találjuk — önszinkronizáció, azaz passzív moduláció esetében. Ezenkívül az ultrarövid impulzusok mérésére szolgáló módszer szerepel még a IV. részben leírt kísérletek közt.

* Érkezett 1970. május 11.

I. Módusszinkronizáció aktív modulációval

Ha laser-rezonátorunkba olyan optikai modulátort helyezünk, mely a rezonátor Q jósági tényezője, azaz a veszteség periódusos változtatására képes: amplitúdó modulált laser-sugárzást kapunk (1. ábra).

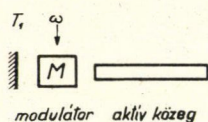
A rezonátor T_1, T_2 tükrői által alkotott Fabry—Perot-rendszer csupán meghatározott frekvenciájú rezgéseket enged meg, melyek eleget tesznek az

$$m\lambda_m = 2L \quad (a)$$

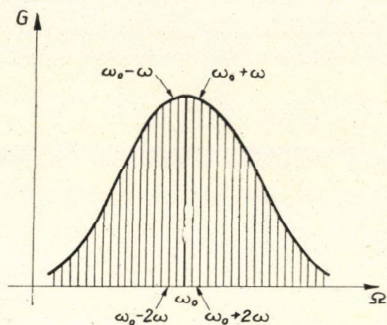
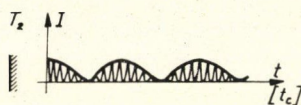
(a)

$$\omega_m = 2\pi \frac{c}{2L} m \quad (b)$$

(b)



1. ábra. Amplitúdó moduláció rezonátoron belül



2. ábra. Axialis módusok az aktív közeg erősítési görbéjén belül

feltételnek, ahol L a rezonátor hossza, m tetszőleges pozitív egész szám, c pedig a fénysebesség. Ezek az úgynevezett axialis módusok λ_m hullámhosszal, illetve ω_m frekvenciával, melyek közül azonban csak az aktív közeg $\Delta\omega$ sávszélességén belül esőkből alakulhat ki a szükséges állóhullám (2. ábra). Az egymástól $\omega = 2\pi \frac{c}{2L}$ frekvenciával különböző szomszédos módusok interferenciája lebegést eredményez. Ha tehát mi ezzel a lebegési frekvenciával változtatjuk a rezonátor jósági tényezőjét, csupán elősegítjük a módusok kölcsönhatását, ezen keresztül szinkronizációját; a „mode-lockingot”.

Tárgyaljuk modulációnkat úgy, hogy a rezonátor aktív közegének vezetőképessége — amely az abszorpciót írja le —, időben és térben változik. (Ha a dielektromos állandó változna, frekvencia-modulált oszcillációt kapnánk.)

A Maxwell egyenletek ez esetben

$$\text{rot } \mathbf{H} = \sigma(\mathbf{r}, t) \mathbf{E} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (a)$$

(2)

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (b)$$

alakban írhatók.

$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ és $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ -t sorbafejtve a rezonátor módusai szerint:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} P_m(t) \mathbf{E}_m(\mathbf{r}) \quad (a)$$

(3)

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{\mu}} \omega_m q_m(t) \mathbf{H}_m(\mathbf{r}) \quad (b)$$

ahol $\frac{k_m}{\sqrt{\mu E}} = \omega_m^*$ (mindez mks rendszerben) és q_m, p_m kanonikusan konjugált változók. Behelyettesítve, (2)b-ből megkapjuk az ismert

$$\dot{q}_m = p_m \quad (4)$$

összefüggést. A másik Maxwell egyenlet pedig a

$$\sum_m \frac{1}{\sqrt{\mu}} \omega_m q_m k_m \mathbf{E}_m = -\frac{\sigma(\mathbf{r}, t)}{\sqrt{\epsilon}} \sum p_m \mathbf{E}_m - \sqrt{\epsilon} \sum \dot{p}_m \mathbf{E}_m \quad (5)$$

összefüggést adja.

Ez utóbbi egyenletünket $\frac{1}{\sqrt{E}} \mathbf{E}_m$ -vel szorozva, és integrálva az üreg V térfogatára (kihasználva a vektortér ortogonalitását):

$$\omega_m^2, q_{m'} = \sum_m S_{m,m'}(t) p_m - \dot{p}_{m'} \quad (6)$$

adódik, melyben

$$S_{m,m'}(t) = \frac{1}{\epsilon} \int_{\text{üreg}} \sigma(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}_m \mathbf{E}_{m'} dV \quad (7)$$

Ez a különböző módusokat összekapcsoló csatolótag csak akkor nem tűnik el, ha $\sigma(\mathbf{r}) \neq \text{const.}$

Normál-módusokat vezetve be:

$$c_m^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_m}} [\omega_m q_m(t) - ip_m(t)] \quad (a)$$

$$(8)$$

$$c_m(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_m}} [\omega_m q_m(t) + ip_m(t)] \quad (b)$$

Láthatjuk, hogy $c_m^*(t)$ és $c_m(t)$ a jól ismert emisszió, illetve abszorpció operátor ($a^*(t)$ és $a(t)$) mintájára definiált változók, de levezetésünkben nem operátorokként, hanem klasszikus változókként szerepelnek. Az ilyen módon meghatározott normál módusokból $q_m(t)$ és $p_m(t)$ könnyen kifejezhető, s (6)-ba helyettesítve, kis átalakítással megkapjuk a „normál módus-amplitúdók mozgásegyenlet”-ét:

$$\dot{c}_m^* = i\omega_m c_m^* - \sum_{m'} K_{m',m}(t) (c_m^*, -c_{m'}) \quad (a)$$

$$(9)$$

$$\dot{c}_m = -i\omega_m c_m + \sum_{m'} K_{m',m}(t) (c_m^*, -c_{m'}) \quad (b)$$

ahol

$$K_{m',m}(t) = \frac{1}{2} S_{m',m} \sqrt{\frac{\omega_{m'}}{\omega_m}} \quad (10)$$

* Levezetésünkben Sláter [7] követjük, aki könyvében az elektromos \mathbf{E} és mágneses térerősséget \mathbf{H} egy S tökéletes vezető felülettel ellátott V térfogatban két ortogonális vektortér \mathbf{E}_m és \mathbf{H}_m segítségével írja le.

A vezetőképességet egy állandó és egy periodikus tag összegeként írva fel

$$\sigma(\mathbf{r}, t) = \sigma_0 + \sigma_1(r) \cos(\omega t + \Phi) \quad (11)$$

az ortogonalitást figyelembe véve

$$K_{m',m}(t) = \frac{\sigma_0}{2\epsilon} \delta_{m,m'} + \frac{k_{m',m}}{2} [e^{i(\omega t + \Phi)} + e^{-i(\omega t + \Phi)}] \quad (12)$$

$$k_{m',m} = \frac{1}{2\epsilon} \sqrt{\frac{\omega_{m'}}{\omega_m}} \int_{\text{üreg}} \sigma_1(\mathbf{r}) \mathbf{E}_m \mathbf{E}_{m'} \quad (13)$$

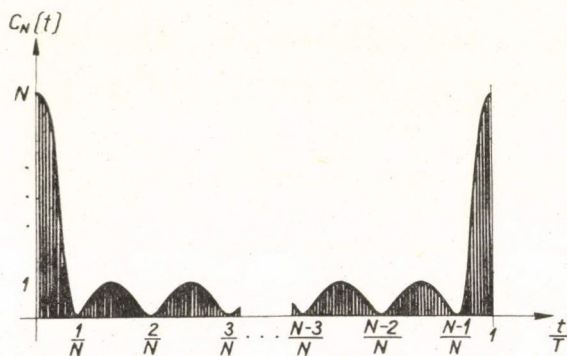
a mozgásegyenletekből a következőt kapjuk:

$$\dot{c}_m^* = i\omega_m c_m^* - \frac{\sigma_0}{2\epsilon} (c_m^* - c_m) + \frac{1}{2} \sum_{m'} k_{m',m} [e^{i(\omega t + \Phi)} + e^{-i(\omega t + \Phi)}] (c_m^* - c_{m'}) \quad (14)$$

illetve \dot{c}_m -ra ennek komplex konjugáltját.

Ha vezetőképességünk periodikus tagjának frekvenciájára az $\omega = \omega_{m+1} - \omega_m$ feltétel érvényes, megoldásunk

$$c_m(t) \simeq c_{(0)} e^{i \left[(\omega_0 + m\omega)t + m\Phi + \frac{m\pi}{2} \right] - \frac{\sigma_0}{2\epsilon} t} \quad (15)$$



3. ábra. N módus szinkronizációjából származó moduláció

alakú lesz, ahol ω_0 az erősítési görbe maximumához legközelebb eső módus frekvenciája.

A lecsengést, $\left(e^{-\frac{\sigma_0}{2\epsilon} t}\right)$, stacionárius esetben az erősítés kompenzálja, és a Φ fázisok ugyanazok a különböző módusokra. Ez azt jelenti, hogy a moduláció szinkronizálta módusainkat (nagy veszteséget okozva az eltérő fázisúaknak). Levezetésünk tehát mit sem veszít általánosságából,

ha Φ -helyébe $-\frac{\pi}{2}$ -et írunk. $c_m(t)$

pontos megoldásában még szerepelne egy m -ed rendű hiperbolikus Bessel-függvény, de ez, akár csak az a tény, hogy az erősítés frekvenciafüggő, nem befolyásolja lényegesen $c_m(t)$ -t. Így a teljes pillanatnyi tér, $c_N(t)$, melyet N egymástól ω frekvenciával különböző, egyenlő amplitúdójú, módus szinkronizálása eredményez:

$$c_N(t) \sim \sum_{m=-\frac{1}{2}(N-1)}^{\frac{1}{2}(N-1)} e^{i(\omega_0 + m\omega)t} = e^{i\omega_0 t} \frac{2 \sin\left(N \frac{\omega}{2} t\right) \sin \frac{\omega}{2} t}{1 - \cos \omega t} \quad (16)$$

Tehát az eredeti ω_0 hordozófrekvencián $M_N(t) = \frac{2 \sin\left(N \frac{\omega}{2} t\right) \sin \frac{\omega}{2} t}{1 - \cos \omega t}$ moduláció „ül” (lásd 3. ábra).

Az ábrán jól látható, hogy az egymást $T = \frac{2L}{c}$ -re követő amplitúdó-maximumok a mellékmaximumoknál N -szer nagyobbak, és félértékszélességük $\tau \cong \frac{T}{N} = \frac{1}{N} \frac{2L}{c}$. Ha figyelembe vesszük, hogy az N módusszámot az határozza meg, hogy az aktív közeg $\Delta\omega$ sáv szélességébe hány módus fér, $N = \frac{\Delta\omega}{\omega}$ azaz a félértékszélesség

$$\tau = \frac{T}{N} = \frac{\frac{2L}{c}}{\frac{\Delta\omega}{\omega}} = \frac{\frac{2L}{c}}{\Delta\omega / 2\pi \frac{c}{2L}} = \frac{2\pi}{\Delta\omega} = \frac{1}{\Delta\nu}. \quad (17)$$

A tér és időbeli viselkedést, modulációnk esetében, valamivel szemléletesebbé teszi, ha L hosszúságú rezonátorunkban az ismert [8] TEM módusok

$$E_j(r, t) = \sin\left[\frac{m_0 + j}{L} \pi x\right] \sin[(\omega_0 + j\omega)t + \Phi_j] \quad (18)$$

szuperpozícióját tekintjük, ahol $m_0 = \frac{\omega_0}{\omega}$, j pedig azt jelöli, hogy a vizsgált módus hány ω -nyira van az erősítési görbe közepétől, ω_0 -tól. A szinkronizáció eredményeképp fázistagunk $\Phi_j = (m_0 + j) \left(\Phi + \frac{\pi}{2} \right)$ [a (15) egyenlettel összevetve], elhagyható, így az N módus eredő tere:

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \left\{ \cos\left[(m_0 + j) \frac{\pi}{L} (x - ct)\right] - \cos\left[(m_0 + j) \frac{\pi}{L} (x + ct)\right] \right\} \quad (19)$$

ω_0 helyébe $m_0 2\pi \frac{c}{2L}$ -t, és ω helyébe $2\pi \frac{c}{2L}$ -t írva, egyszerű átalakítások után az

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \left\{ \cos\left[(m_0 + j) \frac{\pi}{L} (x - ct)\right] - \cos\left[(m_0 + j) \frac{\pi}{L} (x + ct)\right] \right\} \quad (20)$$

kifejezést kapjuk, ami nem más, mint egy a $0 \leq x \leq L$ tartományban fénysebességgel ide-oda futó L/N hosszúságú hullámcsomag. A rezonátor T_1, T_2 tükrerein tehát, egymástól $2L$ távolságra igen rövid impulzusok lépnek ki. Mindehhez azonban egy modulátorra [9] van szükségünk, melynek segítségével kívülről szinkronizál-

hatjuk a módusokat (igen pontosan ω -frekvenciával vezérelve), ami, tekintve, hogy $\omega = \frac{2\pi c}{2L}$ a 10^8 — 10^9 Hz-ig terjedő tartományba esik, nem egyszerű feladat. Érthető tehát, hogy a laserfizikusok szívesebben alkalmazzák a passzív Q -kapcsolókat, melyek a fent leírtakat automatikusan hajtják végre.

II. Módusszinkronizáció passzív modulációval

Nézzük, milyen követelményeknek kell megfelelnie annak az „automata” modulátornak, mely az I. részben leírtakat produkálni képes:

1. Abszorpciós vonal a laser-hullámhosszon,
2. Vonalszélessége nagyobb, vagy egyenlő a laser vonalszélességével,
3. Az oda-vissza futás idejénél $\left(\frac{2L}{c}\right)$, gyorsabb relaxáció.

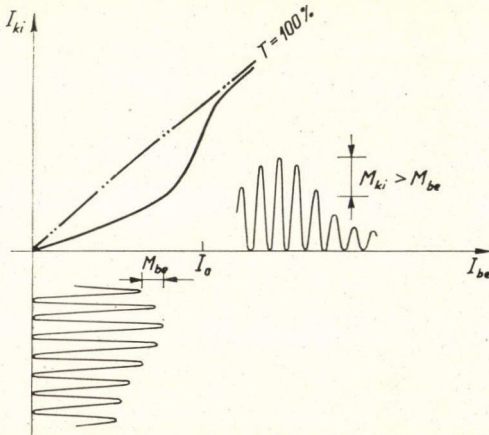
Ez a Q kapcsoló már nem csupán óriás-impulzus („giant-pulse”) előállítására képes, hanem a laser beindulásakor megfelelő fázisban összelebegő módusok hatására (a lebegés frekvenciájával) változtatja kezdeti, T_0 transzmisszióját (4. ábra), s ezzel egyre több módust szinkronizál, illetve oldalmódust „indít be” (lásd (21) egyenlet $E(\omega_0 - \omega)$ és $E(\omega_0 + \omega)$ megjelenése)

$$E(t) = E_0(1 + M \cos \omega t) \cos \omega_0 t = E_0 \cos \omega_0 t + \frac{E_0}{2} M [\cos(\omega_0 - \omega)t + \cos(\omega_0 + \omega)t] \quad (21)$$

$0 \leq M \leq 1$: a moduláció mélysége.

Nézzük, hogy modulál a változó abszorpciójú Q -kapcsoló. Közelítsük intenzitásfüggő transzmissziókat a következő kifejezéssel

$$T(I) = 1 - ke^{-\frac{I}{I_0}(1 + \cos \omega t)} \quad (22)$$



4. ábra. A passzív Q -kapcsoló transzmissziójának intenzitásfüggése és ennek az M -modulációt „erősítő” hatása ($M_{ki} > M_{be}$)

ahol I_0 az az intenzitásérték, melynél az abszorber transzmissziója $\sim 100\%$ -ká válik, k pedig $1 - T_0$. $I \sim I_0$ intenzitásnál, $T_0 = 0,66$ mellett $T_{\max} \sim 95\%$, ugyanekkor $\cos \omega t = 1$, azaz $\omega t = 0, 2\pi, \dots$

A maximumtól $t = \frac{2L}{cN}$ sec-ra:

$$T\left(\frac{2L}{cN}\right) = 1 - ke^{-\left[1 + \cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)\right]}$$

A transzmisszióváltozás okozta relatív amplitúdó csökkenés:

$$\frac{T\left(\frac{2L}{cN}\right)}{T(0)} \simeq e^{-\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \cdot \frac{1}{2T_{\max}}}$$

Ahhoz, hogy ez az arány $1/e$ legyen, $q = 2 \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2$ átmenetre van szükség, mindez:

$$qT \sim 10^4 \cdot 10^{-8} = 10^{-4} \text{ sec-ig tart,}$$

ami azt jelenti, hogy a mode-locking kialakulásához rendelkezésre álló idő alatt, a (22) szerint változó nemlineáris szűrő, a lebegésből képes T/N hosszúságú impulzusokat formálni, hiszen a lumineszcenciától a vonulat végső kialakulásáig milliszekundumok telnek el (valójában a moduláció okozta módus szinkronizáció ezt a folyamatot több nagyságrenddel gyorsabbá teszi).

Mielőtt az eddigi interpretáció elhanyagolásairól beszélénk, nézzük röviden a „konkurrens” elképzelést, és majd a két változat összehasonlításánál vizsgáljuk meg az érvényességi feltételeket.

III. Önszinkronizáció

Ha az I. és II. részben tárgyaltakat, a még megíratlan laser-fizika történet valószínűleg *A. Yariv* [10] és *A. I. Demaria* [11] nevéhez kapcsolja majd, az itt következők *I. A. Fleck* [12] és *V. S. Letohov* [13] nevével fonódtak egybe.

A mode-locking kialakulásának három szakaszát különböztetjük meg,

- (A) Lineáris szakasz: mialatt a teljesítmény a küszöbértéktől a nemlineáris abszorpció szintjéig emelkedik. Ez alatt az idő alatt a véletlen fázisban interferáló spontán sugárzás kvázi-periodikus fluktuáció-vonulattá alakul, s a rezonátor természetes módusszelekciója spektrum-szűkülést okoz, ami a fluktuációk hosszát növeli $\tau_1 > \tau_0$ (τ_0 , a spontán fluktuációk átlagos

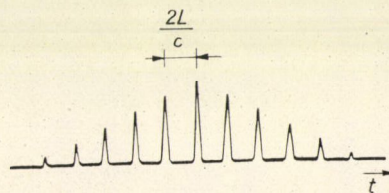
$$\text{hossza: } \tau_0 \approx \frac{1}{\Delta\nu} \Big).$$

- (B) Nemlineáris szakasz: az abszorbens telítődése miatt a teljesítmény ugrás szerűen nő. Az aktív közeg erősítése még lineáris. Ekkor a Q -kapcsoló mint alulvágó-szűrő működik, azaz egy-egy ultrarövid impulzust — melynek amplitúdója eddig csupán alig néhányszorosa volt az átlagnak —, több nagyságrenddel az átlag fölé hagy nőni, ugyanakkor a nemlineáris erősödés közben, az impulzus félértéke csökken: $\tau_2 < \tau_1$.

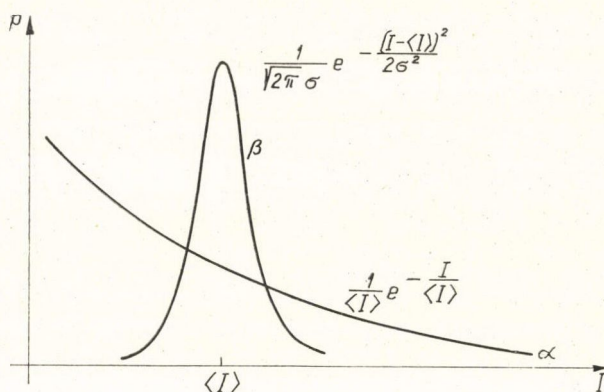
- (C) Telítődési szakasz: Az aktív közeg erősítése telítődik (ennek „köszönhetjük”, hogy nem állandóan növekvő amplitúdójú impulzusok vonulata hagyja el rezonátorunkat, hanem a telítődés miatt az amplitúdók stabilizálódnak, majd lecsengenek, l. 5. ábra). Ebben a szakaszban a Q -kapcsoló abszorbens már nem játszik jelentős szerepet.

Ha rezonátorunk csak axiális módusok [14] kialakulását teszi lehetővé, a lineáris szakasz vége felé (mikor még N módusunk szinkronizálatlan), az eredő sugárzás intenzitás-statisztikáját közelítőleg a következő eloszlás írja le [15]:

$$(\alpha) \quad P(I) = \frac{1}{\langle I \rangle} e^{-\frac{I}{\langle I \rangle}} \quad (23)$$



5. ábra. Mode-locking (-oszcillogram-): passzív Q -kapcsolóval



6. ábra. Az intenzitásfluktuáció eloszlásfüggvényei nagyszámú szinkronizálatlan módus esetében: (α) csak axiális módusok (β), axiális és transzverzális módusok szimultán jelenléte esetén

Amennyiben azonban az axiális módusokon kívül transzverzális TEM módusok is kialakulhatnak, az intenzitáseloszlás [15]

$$(\beta) \quad P(I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(I-\langle I \rangle)^2}{2\sigma^2}} \quad (24)$$

alakot ölt (lásd 6. ábra), ahol σ a szórási.

A második, nemlineáris szakaszban ezek az eloszlások gyökeresen megváltoznak, de nem „felejtik el” teljesen a kiindulási állapotot. A következőkben azt vizsgáljuk meg,

milyen eltérést okoz, ha az (α) vagy (β) eloszlásból alakul ki a mode-locking.

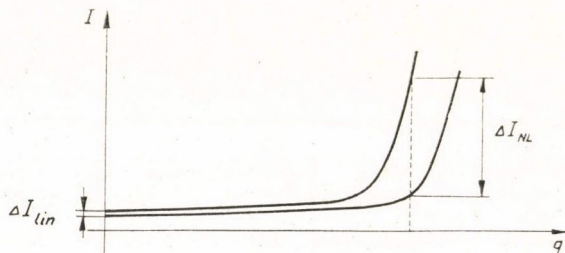
(α): Egy, az átlagot legalább ξ -szeresen meghaladó impulzus előfordulásának valószínűsége:

$$\int_{\xi\langle I \rangle}^{\infty} \frac{1}{\langle I \rangle} e^{-\frac{I}{\langle I \rangle}} dI = e^{-\xi}$$

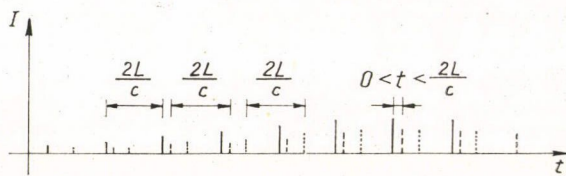
Mivel N módus esetén $T = \frac{2L}{c}$ sec. alatt átlagosan N impulzusunk van, $N \cdot e^{-\xi}$ lesz az ezalatt a periódusidő alatt előforduló, legalább $\xi\langle I \rangle$ intenzitású impulzusok száma. Ha

$$\xi = \ln N,$$

akkor a T periódusidő alatt egy $(\ln N)\langle I \rangle$ nagyságú csúcsunk lesz, nagy valószínűséggel, míg két ilyen, vagy ennél nagyobb impulzus előfordulásának valószínűsége T alatt: $1/N \sim 10^{-3}$. Ha még azt is figyelembe vesszük, hogy a nemlineáris szakasz folyamán a lineáris rész alatt még csak százaléknnyira eltérő impulzusok közt is óriási különbséget okoz a transzmisszió intenzitásfüggése (7. ábra), arra a következtetésre jutunk, hogy (α)-nak megfelelő eloszlás esetén a zajból kiemelkedő egy da-



7. ábra. Két impulzus csúcsteljesítményének alakulása az áthaladások számának (q) függvényében



8. ábra. „Egymásba skatulyázott” mode-locking vonulatok

rab ultrarövid impulzus hozza létre mode-locking vonulatunkat. (A többiekből nem is keletkezhet igazi mode-locking, mert a „kiválasztott” impulzus előbb jut el a teltési tartományba, kiüríti a felső laser-nívót, s így végeredményben a 7. ábrán látható $\Delta I N \Delta I_{NL}$ L -nál is nagyobb különbség lesz a zajban még összemérhető impulzusok közt.)

(β)-eloszlás esetében a szórás a transzverzális módusok számával, r , fordítva arányos és így két összemérhető amplitúdójú impulzus előfordulásának valószínűsége T alatt, r -rel nő. A következmény az, hogy nem egy, hanem több „egymásba skatulyázott” mode-locking vonulatunk lesz (8. ábra), melyek amplitúdó-arányai és egymástól való távolsága minden egyes alkalommal más és más.

Ha tehát a transzverzális módusok kialakulását sikerül megakadályoznunk, megszüntethetjük a reprodukálhatatlanságot, ami a legtöbb mérésnél kellemetlen. Ezzel tulajdonképpen el is kezdtük a kétféle interpretáció összehasonlítását. Bár első rátekintésre alapvető köztük az eltérés (mivel az első már többé-kevésbé kialakult módusok interferenciájából indul ki, a második pedig a spontán emisszió véletlen fluktuációiból, melyek közül éppen az lesz a legnagyobb, melyben a rezonátor módusaival egyező frekvenciájú elektromágneses hullámok megfelelő fázisban, interferálnak), valójában csak a transzverzális módusok hatásának elhanyagolása (II.), illetve figyelembevétele adja (III.) a különbséget. Ha a DeMaria-féle leírásban tekintetbe vesszük, hogy a transzverzális módusok további (véletlen) modulációt jelentenek az axiális módusok összelebegésén, visszakapjuk a Fleck—Letohov-féle eredményt.

Hogy valóban az utóbbi elképzelés áll közelebb a valósághoz, azt több kísérleti tény támasztja alá.

- (1) Az irodalomban több helyen is találkozhatunk olyan megjegyzésekkel, melyek több reprodukálhatatlanul „egymásba skatulyázott” mode-locking vonulatra utalnak.
- (2) *O. Satberasvili és Kertész I. gyűrűlaserben* kimutatták, hogy bár a geometriai viszonyok a mindkét irányban kialakuló laser sugárzásra azonosak (ezzel próbálták néhányan magyarázni a több mode-locking vonulatot, lásd IV/c részt), *jól láthatóan különböző* („egymásba skatulyázott”) *vonulatok alakulnak ki a két irányban*, annak ellenére, hogy a Q -kapcsolón keresztül kölcsönhat a két, független fluktuációból kialakuló sugárzás.
- (3) Több mérés is [5, 16] igazolja, hogy a transzverzális módusokat „elfojtva”, a 9. és 10. ábrán látható módszerekkel a mode-locking-üzemmód stabilabb lett. [16]-ban „ $\Phi\Theta P$ ”-en (több kaszkádos képerősítő igen nagy időbeli felbontó képességgel: $\sim 10^{-11}$ sec) figyelve a keletkező mode-lockingot, egyértelmű bizonyítást nyert a „tisza” mode-locking és a transzverzális módusok közti korreláció.

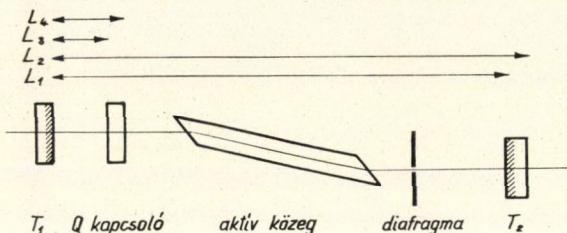
IV. Az önszinkronizáció kísérleti megvalósítása

Azonkívül, hogy abszorbensünk a II. rész elején felsoroltaknak megfelel, több feltétele van még a jó mode-lockingnak.

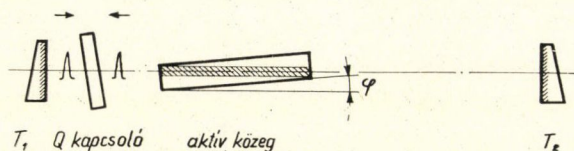
- (a) Hosszú rezonátor (L néhány méter), hogy az aktív közeg sávszélességébe több módus férjen bele, hiszen $N = \frac{\Delta\nu}{\frac{c}{2L}}$. Akár a DeMaria, akár a Fleck—Letohov-féle

elképzelést tekintjük, nyilvánvaló, hogy minél nagyobb az N , annál tökéletesebb a módusszinkronizáció.

- (b) A pumpálás teljesítményét az abszorber transzmissziója határozza meg. Ha ugyanis a pumpálás lényegesen meghaladja a küszöbértéket, a nemlineáris szakasz olyan rövid, hogy nem marad idő a mode-locking kialakulására — és „csak” giant-pulse-unk lesz.



9. ábra. Laser rezonátor „parazita” rezonátorokkal (A diafragma a transzverzális módusok elfojtására szolgál 16)



10. ábra. Laser rezonátor a parazita reflexiók okozta zavaró hatások kiküszöbölésére. (A tengellyel szöget bezáró aktív közeg csak a bevonalkázott részen generál és így módon — mint a 9. ábrán a diafragma — megakadályozza a transzverzális módusok kialakulását 5)

Minél vékonyabb küvettában van az abszorbens, annál kisebb (d) bekövetkezésének valószínűsége.

Sokáig nem sikerült az aktív közeg vonalszélességének megfelelő minimális félértékű impulzust előállítani. Ennek oka az ún. „chirping”. Az n törésmutató és a fázis Φ nemlineárisfüggvényei a frekvenciának:

$$n_j = n_0 + \frac{dn}{dv} (v_j - v_0) + \frac{dn^2}{dv^2} (v_j - v_0)^2 + \dots$$

$$\Phi = \frac{2\pi L}{c} n = \alpha + \beta (v_j - v_0) + \gamma (v_j - v_0)^2 + \dots \quad (25)$$

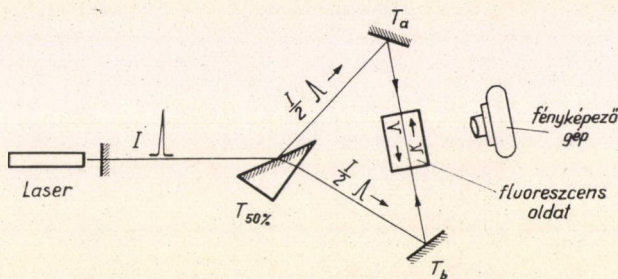
ennek következtében a különböző frekvenciájú módusok számára a rezonátor hossza más és más, illetve a kialakult impulzusban a különböző frekvenciájú fotonok

* A rezonátoron kívül, de nem túl messze elhelyezett reflektáló felületek is beleszámítanak a rendszerbe. Így például a kilépő plánpárhuzamos tükör hátsó fala, vagy a küvetta, az aktív közeg vég-lapjai, stb., mind parazita reflexiót jelent, ha nincs kibillentve, vagy szög alatt lecsiszolva.

futási ideje az $L(n_j)$ úton eltér egymástól, ami a jel hosszát növeli stb. Treacy a rezonátoron kívül kompenzálta az effektust és elérte $\tau \sim (1/\Delta\nu) \sim 4 \cdot 10^{-13}$ sec-os értéket.

A rezonátor tükreinek párhuzamosra állítása távcsővel nagy L esetén nem kis gondot okoz, ha az aktív közeget tartalmazó laser-fejet nem tudjuk kimozdítani a rezonátorból, vagy maga az aktív közeg nem plan-parallel, de He—Ne gázlaser segítségével a rendszer viszonylag könnyen jusztható.

Az így nyert ultrarövid impulzusok — rubinnal $10 \text{ ps} = 10^{-11} \text{ sec}$ Nd üveggel néhány ps-mérése közvetlen módszerrel csak 10^{-11} sec -ig [17] a már említett kép-átalakító segítségével lehetséges. Közvetett módszerrel ennél jóval nagyobb pontosság is elérhető [6, 18]. $2\omega_0$ -nál $\sim 1000 \text{ \AA}$ széles abszorpciós sávval rendelkező fluoreszcens anyagokat használnak* a közvetett mérésre, amikor is két körülbelül azonos



11. ábra. Ultrarövid laserfény-impulzus mérése kétfotonos fluoreszcencia segítségével

intenzitású ultrarövid impulzust szembe találkoztatnak a fluoreszcens anyagban (11. ábra), melyben a fluoreszcenciaintenzitás a laserintenzitás négyzetével arányos. Szembetalálkoztatáskor két $E_1 e^{i(\omega t + kz)}$ és $E_2 e^{i(\omega t - kz)}$ térerősségű nyalábunk van

($E_1 \approx E_2$). Mivel a fotózás időben integrál, a fluoreszcenciaintenzitás: $\int_{-\infty}^{\infty} I^2 dt$ -vel arányos.

$$I \text{ viszont: } |E_1 e^{i(\omega t + kz)} + E_2 e^{i(\omega t - kz)}|^2 = |E_1|^2 + E_1 E_2^* \cos 2kz + |E_2|^2$$

Az emulzió ezenkívül képtelen a hullámhossz nagyságrendjébe eső változásokat követni, így z mentén átlagol:

$$\begin{aligned} I_f(1+2) &\sim \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{k}{\pi} \int_0^{\pi/k} \{|E_1|^2 + 2E_1 E_2 \cos kz + |E_2|^2\}^2 dz = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\pi/k} \{|E_1|^4 + 4E_1^3 E_2 \cos 2kz + 4(E_1 E_2)^2 \cos^2 kz + 2|E_1|^2 |E_2|^2 + \\ &\quad + 4E_1 E_2^3 \cos 2kz + |E_2|^4\} dz = \int_{-\infty}^{\infty} dt [|E_1|^4 + 4|E_1 E_2|^2 + |E_2|^4] \end{aligned}$$

* Rhodamin 6G (rubinra és Nd-re), illetve 9,10-diphenil-antracén (rubinra).

Ez az intenzitás a találkozás helyén. A normált fluoreszcenciaintenzitás:

$$I = \frac{I_f(1+2)}{I_f(1)+I_f(2)} = 1+2G$$

ahol

$$G = \frac{\int 2|E_1|^2|E_2|^2 dt}{\int [|E_1|^4 + |E_2|^4] dt}$$

a normált intenzitás autokorrelációs függvény.

Egyenlő intenzitások esetén tehát G 0 és 1 között változhat, a korrelációtól függően. Mode-lockingnál $I=3$, háttérre (ahol nincs átfedés) viszont $G=0$, így $I=1$. Módusszinkronizáció nélkül egymást átlagosan $2L/c/N$ időközönként követő impulzusokra ott, ahol a szétválasztott impulzusok „önmagukkal találkoznak” $I=3$, ettől jobbra és balra viszont véletlenszerű, hogy az ott jövő impulzussal erősítik, vagy gyengítik egymást, $G=\frac{1}{2}$ és így $I=2$. Ha tehát a kontrasztot (az átfedési intenzitás aránya a háttérhez) nézzük: mode-locking esetében 3-at, szinkronizálatlan impulzusokra $\frac{3}{2}=1,5$ [18] kapunk. Ahol a két impulzus átfedi egymást, a fluoreszcenciaintenzitás tehát jóval nagyobb, s a fényesebb folt l hosszát le mérve: $\tau \sim n \frac{l}{c}$

az impulzus félértéke, ahol n a fluoreszcens anyag törésmutatója.

A mode-locking üzemmód segítségével így módon impulzusonkénti $\sim 10^{-3}$ joule-nyi energia mellett is GW-os teljesítményünk van, mely a nemlineáris jelenségek egész sorát teszi megfigyelhetővé, illetve igen gyors folyamatok vizsgálatához szolgálhat eszközül.

IRODALOM

1. T. H. Maiman, J. O. S. A. 50, p. 1134, 1960.
2. F. I. McClung, R. W. Hellwarth, Proc. IEEE, 51, 46, 1963.
3. N. G. Basov, P. G. Kriukov, V. S. Letohov, Yu. V. Senatski, IEEE QE-4 No. 10., 60, 1968.
4. Farkas Gy., Náray Zs., Varga P. KFKI Közl. 14, 129, 1966.
5. Farkas Gy., Horváth Z., megjelenés alatt.
6. Farkas Gy., Kiss G., megjelenés alatt.
7. J. C. Slater: „Microwave Electronics” Vn Nostrand, Princeton N. I. 1950.
8. G. D. Boyd, I. P. Gordon, Bell. Syst. Techn. J. 40, 489, 1961.
9. L. E. Hargrove, R. L. Fork, M. A. Pollak, Appl. Phys. Lett. 5, 45, 1964.
10. A. Yariv, J. Appl. Phys., 36, 388, 1965.
11. A. J. DeMaria, D. A. Stetser, H. Heynau: Appl. Phys. Lett. 8, 174, 1966.
12. J. A. Fleck, Appl. Phys. Letters, 13, 365, 1968.
13. B. C. Лемохов, ЖЭТФ, 55, 1968.
14. Kiss Á.: Tanulmányterv. KFKI Fiz. Opt. Lab.
15. R. C. Emerson J. Appl. Phys. 24, 1168, 1953.
16. И. Кермес, П. Г. Крюков и Ю. В. Сенатский ЖТФ.
17. А. А. Малутин, М. Я. Щелев, ЖЭТФ. Письма, 9, 3, 1969.
18. E. B. Treacy: Physics Letters 28 A, 34, 1968.

KRISTÁLYFELÜLETEK ÉS DISZLOKÁCIÓK TANULMÁNYOZÁSA MARATÁSSAL*

LENDVAY ÖDÖN

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézete, Budapest

1. *Bevezetés*
2. *Kristályfelületek általános tulajdonságai*
 - 2.1 A kristályok felületi energiája
 - 2.2 A kristályok lebomlásának elemi folyamatai
 - 2.3 A kristályok és kristályfelületek egyensúlyi morfológiája
 - 2.4 A kristályfelületek morfológiájának kvantitatív elmélete.
3. *Kristályfelületek szelektív maratása*
 - 3.1 A maratási gödrök keletkezésének okai
 - 3.2 Maratási gödrök tulajdonságai
 - 3.3 A maratási gödrök morfológiája

1. Bevezetés

A kristályfelületek és környezetük kölcsönhatásának vizsgálata magába foglalja a kristályok felépülésének és lebomlásának problémáit. Számos, a fenti folyamatok szempontjából döntő részlet még ma sem ismeretes kielégítő pontossággal. Tisztázatlan a kristályok felületi energiájának természete és mérése [1], a felületi feszültség, sőt magának a szilárd test felületének a mibenléte is. (Sokan a szilárd testek felületét csak nagyvákuumban tartják olyan pontok összességének, ahol a rendszert jellemző tulajdonságok nem folytonos függvények szerint változnak a helykoordinátákkal.)

A kristályok felépülésének kérdéseivel a jelen munkában nem kívánunk foglalkozni. A közlemény kristályfelületek és telítetlen gőzterük, ill. oldatuk kölcsönhatásait vizsgálja, az ún. termikus és kémiai maratást. Az utóbbi folyamatok a szilárd testek vizsgálatában nagy jelentőségre tettek szert. Segítségükkel igen sok információ nyerhető a kristályokról, ezek ideális és reális szerkezetéről. Különösen az utóbbi bír nagy jelentőséggel; számos diszlokációkra, ezek mozgására, keletkezésére stb. vonatkozó ismeretünk szelektív kémiai maratási vizsgálatok eredménye. Komoly jelentősége van azoknak az egyensúlyi felületi alakzatoknak is, melyek diszlokációmentes felületeken keletkeznek. Ezek vizsgálata a század elejére nyúlik vissza; Gibbs és Wulff a kristályok egyensúlyi alakjára vonatkozó megállapításai [2, 3] még ma is rendkívüli jelentőséggel bírnak. A tökéletes vagy közel tökéletes kristályfelületek egyensúlyi morfológiájának tanulmányozásával aránylag egyszerű úton a kristály fontosabb szimmetriaviszonyairól, a lapok orientációjáról, néhány termodinamikai jellemzőjéről stb. kaphatunk felvilágosítást.

A maratószer (vagy telítetlen gőzter) hatására a kristályok felületén megjelenő

* Érkezett 1970. aug. 16.

felületi morfológia mellett a felületen kialakuló és gyakran magasfokú szimmetriát mutató maratási gödröket is aránylag korán megpróbálták felhasználni a kristályok szerkezetének tanulmányozására. Shockley és Read 1949-ben szemcsehatárok szerkezetét tanulmányozva arra a meggyőződésre jutottak, hogy kisszőgű szemcsehatárok esetén a diszlokációk távolsága elég ahhoz, hogy megfelelő előhívás esetén az egyes diszlokációk mikroszkóposan észlelhetők legyenek [4]. Áttanulmányozva az irodalmat megállapították, hogy Lacombe és Beaujard Al maratására vonatkozó munkáiban [5, 6] ez már valószínűleg realizálódott is, bár az említett szerzők nem voltak tökéletesen tisztában az általuk megfigyelt jelenség valódi magyarázatával. A diszlokációk és maratási gödrök közvetlen kapcsolatát SiC-on sikerült kimutatni, ahol a csavardiszlokációkat jelző növekedési spirálok középpontjában megfelelő maratószerrel valóban keletkeztek maratási gödrök [7–10].

A Shockley—Read modell bizonyítása Vogel és munkatársai nevéhez fűződik [11]. Kimutatták, hogy Ge egykristályban a röntgendiffrakciós mérésekből és a modell alapján a maratási gödrök térközéből számolt Θ orientációkülönbség nagy pontossággal megegyezik. Ez a munka nem csak azt bizonyította, hogy a Shockley—Read modell igaz, de azt is, hogy a maratási gödrök valóban a diszlokációk felbukkanási helyén keletkeznek, és lehetnek éldiszlokációk is. Az utóbbi nem volt nyilvánvaló, ui. a maratási gödrök keletkezését a növekedés ellentétes folyamatának képzelték, ebben viszont Frank elméletének megfelelően csak csavardiszlokációk vesznek részt [12, 13]. Később Hodges és Mitchell AgCl-ben [14, 15], Dash pedig Si-ban [16] dekorációs módszerek felhasználásával is kimutatta, hogy a maratási gödrök diszlokációk felbukkanási pontjain keletkeznek. Hasonló eredményre jutott Newkirk is LiF és Si esetén röntgentopográfias módszerek felhasználásával [17, 18].

A fenti közlemények megjelenése óta számos anyagon és a legkülönbözőbb módszerek kidolgozásával sikerült bebizonyítani, hogy a maratás mennyire hasznos diszlokációk tanulmányozásában. Felbontóképessége megközelíti a transzmissziós elektronmikroszkópiával elérhető maximális értéket ($\sim 0,01 \mu\text{m}$), ugyanis, elektronmikroszkópos módszereket felhasználva $0,05 \mu\text{m}$, optikai mikroszkóppal $0,5 \mu\text{m}$ távolságra levő maratási gödrök még jól megkülönböztethetők [19]. (Tájékoztatásul a dekorációs technika felbontóképessége $\sim 0,5 \mu\text{m}$, a röntgentopográfias módszereké néhány μm [19–21].) A minta előkészítése egyszerű, és nem jelent olyan durva beavatkozást, mint a dekoráció, vagy a transzmissziós elektronmikroszkópiánál az 1000 \AA körüli értékre történő levékonyítás. Legnagyobb hátránya az, hogy felületi módszer lévén, nem ad tájékoztatást a térfogati viszonyokról. Ez a hátrány kiküszöbölhető akkor, ha az anyag metszeteit vizsgáljuk, vagy ha a felületi réteg állandó eltávolításával újabb és újabb felületeket állítunk elő. Ez a módszer a minta erős roncsolódásával vagy megsemmisülésével jár, de lehetőséget nyújt a teljes térfogat vizsgálatára. Igen jelentős előny, hogy aránylag nagy diszlokációsűrűségekig (10^8 – 10^{10} cm^{-2}) a maratási gödrök egyszerű, optikai mikroszkóppal is jól tanulmányozhatók. Mindezen előnyök azt eredményezik, hogy a maratási módszer a szilárd testek vizsgálásánál igen elterjedt, és a legkülönbözőbb, diszlokációkkal kapcsolatos problémák tanulmányozására használják, melyekre később még visszatérünk.

A maratási gödrök tanulmányozása szorosan kapcsolódik a hibamentes kristályfelületek tanulmányozásához. A maratási gödrök makroszkópos falai a tökéletes síkok oldódásával analóg módon jönnek létre, ezért mindazon ismeret, mely

az utóbbi területre vonatkozik, a szelektív kémiai maratásnál is alkalmazható. A felületre felbukkanó diszlokáció különleges hatása csak kis tartományra korlátozódik, a maratási gödör csúcsának környezetében. A fal legnagyobb részére azok a törvényszerűségek érvényesek, melyek a tökéletes kristályfelületek (a tökéletes alatt diszlokációmentes felületeket értünk) viselkedését megszabják, ezért először ezekkel fogunk foglalkozni.

2. Kristályfelületek általános tulajdonságai

2.1. A kristályok felületi energiája

Gibbs után szokásos a felülethez definiált nagyságú extenzív mennyiségeket (energiát, entrópiát stb.) rendelni. Ezek meghatározásához a különböző fázisokat ún. osztófelületekkel kell elválasztani. Az osztófelület definíciószerűen geometriai felület, mely a valódi fizikai felülettel azzal a pontossággal egyezik meg, mellyel az utóbbi meghatározható. Kiválasztva valamilyen falakkal határolt, zárt tartományt, melynek falai merőlegesen metszik az osztófelületet, az így előállított rendszer energiája α és β fázisok esetén

$$E = E_\alpha + E_\beta + E_F \quad (2.1.1)$$

Az E_α és E_β értékeit megkapjuk, ha a megfelelő fázisok V_α és V_β térfogatait megszorozzuk a fázisok energiasűrűségével, melyről feltételezzük, hogy az osztófelületig állandó. E_F a felülethez rendelhető energiafelesleg. A nagyságú osztófelület esetén E/A a felületi energia, S/A a felületi entrópia, N_i/A pedig az i -edik komponens felületi sűrűsége, Γ_i . A felületegységhez rendelhető szabadenergia

$$f_F = \mu_F - T s_F \quad (2.1.2)$$

míg a szabadentalpia értéke állandó hőmérsékleten

$$g_F = \sum_i \mu_i \Gamma_i \quad (2.1.3)$$

ahol μ_i az i -edik komponens kémiai potenciálja. μ_i egyensúly esetén a rendszer minden pontján állandó. Az egységnyi új felület létrehozásához szükséges munka, a felületi energia definíciószerűen

$$\gamma = f_F - g_F = u_F - T s_F - \sum_i \mu_i \Gamma_i \quad (2.1.4)$$

Az előző egyenletekben szereplő valamennyi mennyiség értéke attól függ, hogyan választottuk meg az osztófelületet. Szilárd testekre a Gibbs féle megoldást szokás választani. Az osztófelületet ennek értelmében úgy jelöljük ki, hogy a szilárd testet alkotó komponens (vagy legfontosabb komponens) felületi sűrűsége Γ_i , az osztófelületen nullává válik. Ilyenkor $\gamma = f_F$ ha a szilárd test egykomponensű, és a szabad felületet vizsgáljuk.

A kémiai potenciálokat a homogén fázisokra definiálhatjuk:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial F_j}{\partial N_i} \right)_{T, v, N_j \neq i} = \left(\frac{\partial G_j}{\partial N_i} \right)_{T, N_j \neq i, \sigma} \quad (2.1.5)$$

ahol $j = \alpha, \beta, \sigma$ pedig a szilárd testben levő nyírófeszültség. Az utóbbi szerepére még visszatérünk. Egy általános termodinamikai rendszerben, ahol a térfogatok állandóak maradnak, csak a belső felületek változnak, a térfogathoz rendelt E_j energiák nem változnak. Szilárd testekre ez leggyakrabban nem teljesül, mivel a belső felületek megváltozását gyakran a térfogatban felhalmozódott feszültségek átrendeződése kíséri, és így σ állandóságának feltétele nem teljesül.

Ha γ -t valamilyen ψ mennyiség felületi sűrűségének tekintjük [22], akkor az előzőek értelmében

$$\psi = F - \sum_i \mu_i N_i \quad (2.1.6)$$

ahol F a felület szabadenergiája. Homogén térfogati fázisra

$$\psi_\alpha = -p_\alpha v_\alpha \quad (2.1.7)$$

mivel

$$F_\alpha = G_\alpha - p_\alpha v_\alpha \quad \text{és} \quad G_\alpha = \sum_i \mu_i N_{i\alpha}$$

A fenti egyenletekből látható, hogy ψ változása mechanikai munka jellegű.

Ha dA végighalad a teljes osztófelületen, az előzőek értelmében

$$\psi = \int \gamma dA \quad (2.1.8)$$

Egyensúly esetén a rendszerben ψ értéke minimális a felület alakjának minden változásával szemben. Ez az ún. Gibbs-tétel. Ha állandó T -nél és μ -nél a rendszeren valamilyen reverzibilis mechanikai változást előidézzünk, akkor a felületi munka nagysága $\Delta \int \gamma dA$.

Folyadékoknál, ahol $\gamma = \gamma(T, \mu)$ a felületi munka az előzőek figyelembevételével γdA ($T, \mu_i = \text{const}$). Izotróp esetén ez szilárd testekre is gyakran teljesül. Ha nincs a rendszerben felületi munkavégzés, akkor szilárd testek esetén μ , ill. T változásakor a következő összefüggések érvényesek:

$$\begin{aligned} df_F &= \sum_i \mu_i d\Gamma_i - s_F dT \\ d\gamma &= -s_F dT - \sum_i \Gamma_i d\mu_i \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

Az utóbbi két egyenlet nem teljesül, ha a folyamat közben a felület morfológiája (orientációja, görbülete stb.) megváltozik.

Ha γ anizotróp, akkor $\int \gamma dA$ -ból nem emelhető ki és az integrálást a teljes felületre el kell végeznünk.

Megnehezíti a szilárd testek tárgyalását az, hogy különbséget kell tennünk a γ felületi energia és a deformációval előálló felületváltozás, a τ felületi feszültség között. A kettő általában nem egyenlő [22]. Egy kis, az i -edik kristálylapon levő $l_1 \times l_2$ felület infinitezimális deformálásakor

$$\tau_1 = \gamma_i + l_1 \frac{\partial \gamma_i}{\partial l_1} \quad \text{és} \quad \tau_2 = \gamma_i + l_2 \frac{\partial \gamma_i}{\partial l_2} \quad (1.1.10)$$

egyenletek teljesülnek [23], ahol τ_1 és τ_2 a τ_{ij} tenzor l_1 és l_2 irányú komponensei. Mivel általában

$$\frac{\partial \gamma_i}{\partial l_j} \neq 0 \quad (j=1, 2) \quad (2.1.11)$$

τ_1 és τ_2 különbözni fog γ_i -től és egymástól is. Folyadékoknál a deriváltak nyilvánvalóan 0-t adnak, ezért $\tau_1 = \tau_2 = \gamma$. A τ értékeket a kristály belsejében levő feszültségek kompenzálják, ezek jelentik azokat a hosszútávú erőket, melyek miatt (2.1.5)-ben σ is szerepel.

A γ_i értékek elméleti úton megbecsülhetők. Ha felhasználjuk a Kossel, Stranski és munkatársai által egyszerű kovalens, köbös rácsokra kidolgozott elméletet [24–26] γ értéke közelíthető a kötésenergiák felhasználásával [27]. Ha Φ_1 -gyel jelöljük az a távolságra levő közvetlen szomszédok, Φ_2 -vel az $a\sqrt{2}$ távolságra levő második és Φ_3 -mal az $a\sqrt{3}$ távolságra levő harmadik szomszédok közötti kölcsönhatási energiát (l. 1. ábra), akkor egyszerű köbös rács elhasítása esetén a $\{001\}$ síkokkal párhuzamosan keletkező felületeken a szétváló molekulapárok energianövekedése közelítőleg $\Phi_1 + 4\Phi_2 + 4\Phi_3$. Mivel az egy-egy molekulára jutó felület a^2 , a felületi energiasűrűség

$$e = \frac{\Phi_1 + 4\Phi_2 + 4\Phi_3}{2a^2} \quad (2.1.12)$$

A kristály belsejében levő molekulák kötésenergiája a magasabbrendű kölcsönhatások elhanyagolásával

$$\Phi_b = 6\Phi_1 + 12\Phi_2 + 8\Phi_3 \quad (2.1.13)$$

az elemi lépcsők kiugrása (kink, Halbkristallage, Wachstumstelle) mentén levőké ennek a fele. Mivel — mint később látni fogjuk — a molekulák lepárolgása elsősorban ezekről a helyekről történik, az előző, Φ_k érték

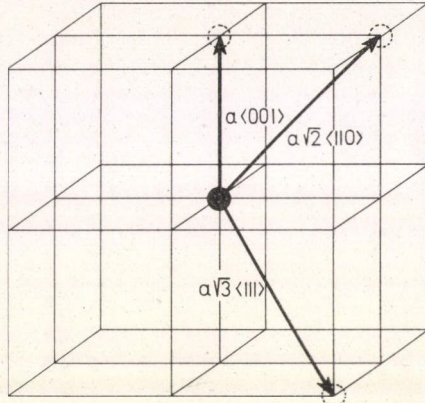
$$\Phi_k = 3\Phi_1 + 6\Phi_2 + 4\Phi_3 \approx \Delta H_{sz} \quad (2.1.14)$$

ahol ΔH_{sz} az egy molekulára eső párolgási energia. Mivel $\Phi_1 \gg \Phi_3$, a fenti egyenletek összehasonlításából

$$e = \frac{\Phi_k}{6a^2} \approx \frac{\Delta H_{sz}}{6a^2} \quad (2.1.15)$$

és a moláris párolgási energia

$$\Delta H = N_0 \Delta H_{sz} \quad \text{és} \quad N_0 \Omega = V \quad (2.1.16)$$



1. ábra. Egyszerű köbös rács koordinációs viszonyai. A középpontban levő atomok 6 első, 12 második és 8 harmadik közvetlen szomszédja van a $a/\sqrt{2}$ és $a/\sqrt{3}$ távolságra

ahol N_0 az Avogadro szám, $\Omega = a^3$ és V a móltérfogat. E_M moláris felületi energia a fentiek felhasználásával

$$E_M = N_0^{1/2} V^{2/3} e \approx \frac{\Delta H}{6} \quad (2.1.17)$$

0 °K-nál $e = \gamma$. $T > 0$ esetén $e > \gamma$, és az ún. γ_M moláris felületi szabadenergia a {001} felületeken

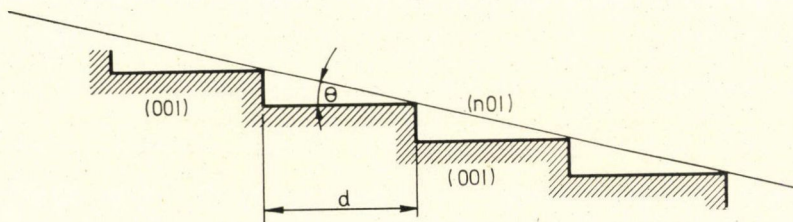
$$\gamma_M = N_0^{1/3} V^{2/3} \gamma_{(001)} \approx \frac{\Delta H}{c} \quad (2.1.18)$$

ahol $4 < c < 10$. Ha nem a felületet, hanem egy elemi lépcsőhöz tartozó energiafelesleget vizsgáljuk, teljesen hasonló megfontolások alapján megbecsülhetjük a vonal menti feszültségeket is. Mivel a $\langle 100 \rangle$ irányú lépcsőkhöz tartozó energia

$$e_{\langle 100 \rangle} = \frac{\Phi_1 - 2\Phi_2}{2a} \sim ea \quad (2.1.19)$$

az egységnyi hosszra eső vonal menti feszültség

$$\beta_{\langle 100 \rangle} = \gamma_{(100)} \cdot a \quad (2.1.20)$$



2. ábra. Elemi lépcsőkből felépülő, (n 01) sík. A felület (001) és (010) típusú síkokból épül fel. A burkoló sík és a (001) közötti szög θ

Ha a felületet nem kis indexű, hanem pl. (n 01), ahol $n \gg 1$, akkor a 2. ábrának megfelelően összetett sík keletkezik, melyet a (001) síkon fellépő, azonos d távolságra lévő elemi lépcsők hoznak létre. A burkoló sík θ hajlásszöge 0 °K-en

$$\theta \sim \tan \theta = \frac{1}{n} \quad (2.1.21)$$

Ilyen esetekben a (n 01) felület energiája a kisindexű (001) síkok és a lépcsők energiájának összegeként adható meg, ezért

$$\gamma_{(n01)} = \gamma_{(001)} + \frac{\beta}{na} \approx \gamma_{(001)} + \frac{\beta}{a} \theta \quad (2.1.22)$$

(2.1.22) általánosságban is igaz. Ha egy kisindexű, \bar{n} normálisú síkot és egy $\bar{n} + \delta\bar{n}$ normálisú síkot hasonlítunk össze ($\delta\bar{n} < 1$), feltételezhető, hogy $\gamma(\bar{n} + \delta\bar{n})$ a $\gamma(\bar{n})$ -től egy, a lépcsők δ sűrűségével aszimptotikusan változó mennyiséggel különbözik [22].

Ha az \bar{n} normálisú sík egyensúlyban van a környezetével, akkor a hozzátartozó felületi energia is minimális az adott feltételek mellett. Ez azt jelenti, hogy

$$\Delta\gamma = \gamma(\bar{n} + \delta\bar{n}) - \gamma(\bar{n}) \quad (2.1.23)$$

$\delta\bar{n}$ minden irányára pozitív lesz, azaz γ -nak \bar{n} irányba minimuma van. Ez a minimum általában közepes T -ken igen éles. Az ilyen helyeken a $\gamma(\bar{n})$ függvény deriváltja nem folytonos, és $\delta\bar{n}$ előjelváltásánál a görbének csúcsa van.

Ha ábrázoljuk $\gamma(\bar{n})$ valamennyi lehetséges értékét, egy olyan felületet kapunk, melyen az említett (negatív) csúcsok jelölik a Gibbs-tételnek megfelelően az egyensúlyi kristályfelületek normálisait. A fenti felület adott krisztallográfiai zóna mentén történő metszésével kapjuk az ún. γ -görbét, mely rendkívül fontos szerepet tölt be a kristályok egyensúlyi feltételeinek vizsgálatában [28].

Ha $T > 0^\circ\text{K}$, termikusan aktivált folyamatok következtében a lépcsősűrűség (δ) és a lépcsőkön levő kiugrások száma erősen megváltozik. Ilyenkor a felület állapotának jellemzésére az ún. egyenetlenségi tényezőt használják, melynek értéke [12]

$$A = \frac{u - u_0}{u_0} \quad (2.1.24)$$

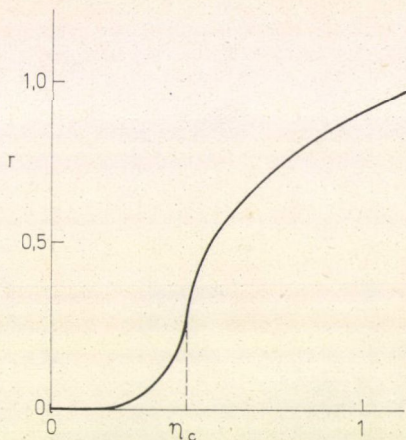
ahol u_0 az egy molekulára eső felületi potenciális energia 0°K -en sík felületen, míg u adott $T^\circ\text{K}$ -en a reális felület potenciális energiája molekulánként. Köbös (001) felületen pl. A közelítő értéke a felülettel párhuzamos, felszakadt kötések számának egy molekulára jutó átlagértékével egyenlő.

Ha $2p$ valószínűsége van annak, hogy egy felületi lépcső adott pontján van kiugrás, q pedig annak valószínűsége, hogy nincs, A értékét a $\eta = P/q$ függvényében a 3. ábrán tüntettük fel [29, 30]. Mivel $\eta = \eta(T)$, jól látható, hogy A egy kritikus T_k hőmérsékletig ($\eta_k = \eta(T_k)$) igen kis érték. Ebben a hőmérsékleti tartományban a felület egyenetlenségei elsősorban felületi vakanciákra, ill. adszorbeált molekulák jelenlétére vezethető vissza. Ha $T > T_k$, vakancia-asszociátumok, ill. adszorbeált molekulákból álló szigetek keletkeznek, és A rohamos növekedése figyelhető meg.

Köbös kristályok esetén a $\{001\}$ síkokon [22]

$$T_k \sim 0,57 \frac{\Phi_1}{k} \quad (2.1.25)$$

ami Φ_1 , ismeretében igen magas, általában magasabbnak adódik, mint a kristály olvadáspontja. (k a Boltzmann állandó). Ez azt jelenti, hogy a $\{001\}$ felületek olvadáspontjukig sima síkok maradnak, ezért a γ -görbén az egyensúlyi alaknak megfelelő csúcs magas hőmérsékleteken is megmarad.

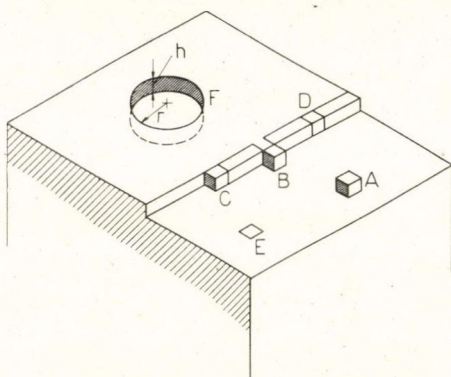


3. ábra. A felületi egyenetlenség változása az elemi lépcsők alakjának függvényében

A fenti analízis más síkokra is elvégezhető. Olyan esetekben, ahol a második közvetlen szomszédval való kölcsönhatás is jelentős, T_k értéke a termikus fluktuációk következtében erősen csökken. Ennek az az oka, hogy a termikus fluktuációk a Φ_2 -höz tartozó kötések könnyebben megbontják, mint a Φ_1 -hez tartozóakat. Ilyen lapok pl. a köbös $\{110\}$ lapok (l. 1. ábra). A fenti hatás fokozottan érvényre jut a $\{111\}$ síkokon, ahol a síkban csupán Φ_2 típusú kölcsönhatások fordulnak elő.

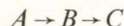
2.2. Kristályok lebomlásának elemi folyamatai

A kristályok növekedése és oldódása vagy elpárolgása azonos jellegű, de ellentétes irányú folyamatok eredménye. Egy-egy orientált sík réteg felépüléséhez vagy lebomlásához elemi lépcsők jelenlétére van szükség. Az egyes h magasságú elemi



4. ábra. Kristályfelületen lehetséges molekula-helyzetek: A — adszorbeált molekula a felületen; B — monomolekuláris lépcsőn adszorbeált molekula; C — kiugrás elemi lépcsőn; D — elemi lépcsőbe épült molekula; E — kétdimenziós oldódási góc

ki, hogy növekedésnél a molekula az



utat teszi meg [26]. Párolgásnál vagy oldódásnál a fordított folyamat játszódik le, mielőtt a molekula elhagyja a szilárd fázist. Frenkel, majd Burton és Cabrera vizsgálatai szerint [31] a gyakorlatilag számba jöhető hőmérsékleteken az elemi lépcsőkön elég nagyszámú kiugrás keletkezik a termikus fluktuációk következtében, ezért az ilyen „megbontott” felületek lebomlása gyors. Az elemi réteg lebomlása után visszamaradó tökéletes síkfelületen újabb elemi lépcső csak kétdimenziós nukleációval jöhet létre. Az így keletkező

oldódási góc megjelenése véletlenszerű és csak akkor valószínű, ha a rendszerben nagy kémiai potenciálkülönbségek vannak.

Az egyszerűség kedvéért feltételezhető, hogy a kétdimenziós mag hengeres, és r sugara van. (L. 4. ábra.) Az egységnyi palástmagasságú üreg keletkezéséhez szükséges munka egy felületi és egy térfogati részből áll:

$$\Delta G_s = 2\pi r\gamma + \frac{r^2\pi}{\Omega}\Delta\mu \quad (2.2.1)$$

ahol $\Delta\mu$ az a kémiai potenciálkülönbség, amely egy molekula oldatba történő átmeneténél keletkezik.

Egyensúly esetén

$$\frac{d\Delta G_s}{dr} = 0 \quad \varrho_s = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} \quad (2.2.2)$$

ahol ϱ_s a kritikus méretű oldódási góc sugara. A fenti két egyenletből közvetlenül következik, hogy egyensúlyi feltételek mellett a kritikus sugarú góc létrehozásához szükséges munka

$$\Delta G_s^* = -\frac{\pi\gamma^2\Omega}{\Delta\mu}h \quad (2.2.3)$$

ahol h a lépcső magassága. Mivel termikusan aktivált folyamatról van szó, a gócképződés gyakorisága egyensúlyi körülmények között

$$\xi = n \exp\left(-\frac{\Delta G_s}{kT}\right) = n \exp\left(\frac{\pi\gamma^2\Omega}{\Delta\mu kT}\right) \quad (2.2.4)$$

ahol n annak a gyakorisága, hogy egy molekula a szilárd fázisból a környezetbe lép át.

A kritikus mag képződésével a sík lebomlásához szükséges elemi lépcső megjelenik a felületen, és a további folyamatok sebességét az egyidejűleg jelenlevő oldódási gócok sűrűsége, a keletkezett elemi lépcsőkön a kiugrások sűrűsége stb. szabja meg.

Mint azt az előző fejezetben láttuk, a kristály felületén levő elemi lépcsők és az ezeken levő kiugrások sűrűsége rendkívül erősen függ a hőmérséklettől. Ha a lép-



5. ábra. Kiugrások keletkezése a molekulának a lépcsőből történő kiválása útján

csők haladási irányát x -nek választjuk, akkor a lépcsőből kiváló molekula által létrehozott profil az 5. ábrának felel meg. A kiugrásnál levő molekula energiája közelítőleg $\frac{\Phi_1}{2}$, mivel egy molekula kiválásával 4 kiugrás keletkezik, és a folyamat-
hoz tartozó energiaváltozás $\sim 2\Phi_1$. Ha — mint láttuk — annak valószínűsége, hogy x -nél kiugrás van $2p$ és q az ellentétes eset valószínűsége

$$2p + q = 1,$$

másrészt [12]

$$\eta = \frac{p}{q} = \exp\left(-\frac{\Phi_1}{2kT}\right) \quad (2.2.5)$$

ha elhanyagoljuk a magasabbrendű kölcsönhatási tagokat. A fenti egyenletek felhasználásával p kifejezhető:

$$p = \frac{\exp A(T)}{1 + 2 \exp A(T)} \quad (2.2.6)$$

ahol

$$A(T) = -\frac{\Phi_1}{2kT}$$

és az adott lépcső hosszegységére eső pozitív és negatív kiugrások (l. 5. ábra) száma

$$N = \frac{\exp A(T)}{\left(\frac{1}{2} + \exp A(T)\right)a} = \frac{2p}{a} \quad (2.2.7)$$

Ha a lépcső haladási iránya Θ szöget zár be az x tengellyel (melyet célszerű úgy megválasztani, hogy egybeessen valamelyik kisindexű iránnyal), akkor a pozitív és negatív kiugrások nem egyenlő sűrűséggel jelentkeznek. Θ kis értékeire

$$\Theta \sim \operatorname{tg} \Theta = P_{(+)} - P_{(-)} \quad (2.2.8)$$

Mivel a $P_{(+)}$ és $P_{(-)}$ valószínűségeknek [12] ki kell elégítenie a

$$P_{(+)} \cdot P_{(-)} = q^2 \exp A(T) \quad \text{és} \quad (2.2.9)$$

$$P_{(+)} + P_{(-)} - q = 1 \quad (2.2.10)$$

feltételeket, ha elhanyagoljuk Θ magasabb hatványait

$$P_{(+)} + P_{(-)} = \frac{2 \exp A(T)}{1 + 2 \exp A(T)} + \frac{\Theta^2}{4 \exp A(T)} \quad (2.2.11)$$

Az x irányba eső vonalmenti energia sűrűsége

$$e_l = \frac{\Phi_1}{2a} + \frac{(P_{(+)} + P_{(-)})\Phi_1}{2a} \quad (2.2.12)$$

ahol a második tag a [01] iránnyal párhuzamos, „bomlott” kötések miatt lép fel. Ezek sűrűsége nyilvánvalóan $(P_{(+)} + P_{(-)})/a$. Ha az entropiakülönbségek konfigurációs, valamint a molekulák rezgési és forgási állapotából eredő részét elhanyagoljuk, akkor a β vonal menti feszültség e_l -vel közelíthető.

Mivel

$$\beta = \frac{(1 + P_{(+)} + P_{(-)})\Phi_1}{2a} \quad (2.2.13)$$

(2.2.6) felhasználásával

$$\beta = \beta(\Theta) = \beta_0 + 4 \exp[-A(T)] \Theta^2 \quad (2.2.14)$$

ahol

$$\beta_0 = \frac{\Phi_1}{2a} \left(1 + \frac{2 \exp A(T)}{1 + 2 \exp A(T)} \right) \quad (2.2.15)$$

annak a lépcsőnek a vonalmenti feszültsége, melynek iránya párhuzamos [01]-gyel.

A lépcsővel megbontott sík leoldódási sebessége

$$\bar{v}_l = b^* K \eta v \exp \left(-\frac{\Delta H}{kT} \right) \quad (2.2.16)$$

ahol a η telítetlenség értéke

$$\eta = 1 - \exp \left(-\frac{\Delta \mu}{kT} \right) \quad (2.2.17)$$

K sebességi állandó, ν frekvenciafaktor, melynek értéke $\sim 10^{13} \text{ sec}^{-1}$, b^* a lépcsőt alkotó atomsor vastagsága ($b^* \approx a \approx h$), ΔH pedig az oldáshő.

Mivel Θ kis értékeinél az előző közelítés jól teljesül, ΔH pedig kifejezhető (2.1.18) és (2.1.22) felhasználásával.

$$\bar{v}_t = b^* k \eta \nu \exp \left(-\frac{6N_0 \Omega \beta}{kT} \right) \quad (2.2.18)$$

Behelyettesítve β értékét (2.2.14) alapján

$$\bar{v}_t = \eta C(T) \exp [-4\Theta^2(T)] \quad (2.2.19)$$

ahol

$$C(T) = b^* k \nu \exp \left(-\frac{6N_0 \Omega}{kT} \beta_0 \right) \quad (2.2.20)$$

és

$$D(T) = \exp [-A(T)] \quad (2.2.21)$$

A felületre normális irányú \bar{v}_s maratási sebességet a Johnson—Mehl-modell [32] alapján közelíthetjük. Ha egy ϑ pillanatban keletkezett góc τ ideig $\pi \bar{v}_t^2 (\tau - \vartheta)^2$ felületre nő, akkor n' gócképződési gyakoriság esetén a $0 \rightarrow \tau$ időintervallumban keletkezett, gócok által borított felület nagysága

$$F = \pi \bar{v}_t^2 n' \int_0^\tau (\tau - \vartheta)^2 d\vartheta = \frac{\pi}{3} n' \bar{v}_t^2 \tau^3 \quad (2.2.22)$$

Ha τ éppen egy elemi sík leoldásához szükséges idő, $F=1$ és $\pi/3 \approx 1$ miatt

$$\bar{v}_s = a(n' \bar{v}_t^2)^{1/3} \quad (2.2.23)$$

ahol

$$n' = \frac{\nu}{b^* b} \exp \left(-\frac{\Delta G_s + \Delta H}{kT} \right) \quad (2.2.24)$$

2.3. A kristályok és kristályfelületek egyensúlyi morfológiája

Elhanyagolva az előző fejezetben megemlített entrópiakülönbségeket, Stranski és Kaischew szerint [33—36] a kristály különböző helyein (síkfelületen, élen, csúcson stb.) a molekulák kötésienergiájának különbsége a kémiai potenciálok különbségéből származik:

$$\mu_i - \mu_j = \Phi_i - \Phi_j \quad (2.3.1)$$

Egyensúly esetén az egy molekulára eső közepes kémiai potenciál azonos valamennyi krisztallográfiai síkra:

$$\frac{\sum_{k=1}^{n_i} \mu_{ik}}{n_i} = \frac{\sum_{L=1}^{n_j} \mu_{jL}}{n_j} = \bar{\mu}_j \quad (2.3.2)$$

ahol az i -edik és j -edik felület n_i , ill. n_j molekulát tartalmaz. Vizsgáljunk meg egy $2h$ élhosszúságú kristálylapot. Az élek mentén levő molekulák száma $2h/a$. Hanya-

goljuk el első közelítésben Φ_2 és Φ_3 értékét és vizsgáljuk meg az energiaváltozást a lapon akkor, ha egy új elemi réteg épül úgy fel, hogy egy azonos hőmérsékletű, végtelen lapon levő lépcső kiugrásáról vittük át a molekulákat. Az első molekula sarokra épül be, és az energiaváltozás $2\Phi_1$. A két él mentén felépülő sorok energiaszükséglete $2(2h/a-1)\Phi_1$. A sík további betöltéséhez szükséges energiaváltozás nulla, mivel az egyes molekulák az eredetivel azonos helyzetbe kerülnek. $(2h/a)^2$ molekula átmenetéhez szükséges összes energia a fentieknek megfelelően

$$2\Phi_1 + 2\left(\frac{2h}{a} - 1\right)\Phi_1 = \frac{4h\Phi_1}{a} \quad (2.3.3)$$

és a $\bar{\Phi} - \Phi_k$ közepes energiaváltozás

$$\frac{\frac{4h\Phi_1}{a}}{\left(\frac{2h}{a}\right)^2} = a \frac{\Phi_1}{h} \quad (2.3.4)$$

Mivel 2.1.12 értelmében $\Phi_{1i} \approx 2\gamma_i a^2$ és 2.3.1 teljesül,

$$\bar{\Phi} - \Phi_k = \frac{2\gamma_i \Omega}{h_i} = \bar{\mu}_{hi} - \mu_\infty \quad (2.3.5)$$

ahol $\bar{\mu}_{hi}$ a véges méretű kristály felületi molekuláinak kémiai potenciálja. (2.3.5) a Gibbs—Thomson egyenlet szilárd testekre érvényes alakja. Mivel egyensúlyban (2.3.2) érvényes, $\bar{\mu}_{hi} - \mu_\infty = \text{konst}$, és megkapjuk az ún. Wulff-szabályt. A Wulff-szabály szerint ha a Gibbs feltétel

$$\sum_i \gamma_i dA_i = \text{minimum} \quad (2.3.6)$$

teljesül, akkor a kristály belsejében lesz egy olyan pont, melynek az i -edik felülettől ($i=1, 2, \dots, n$) mért h_i merőleges távolsága arányos γ_i -vel.

$$\frac{\gamma_1}{h_1} = \frac{\gamma_2}{h_2} = \dots = \frac{\gamma_i}{h_i} \quad (2.3.7)$$

Folyadékoknál a Wulff pont egy gömb középpontja, szilárd testeknél a Wulff-felület bonyolultabb térbeli alakzat.

A felületen létrejövő elemi, ún. kétdimenziós szigetekre a fenti összefüggések szintén felírhatók, γ_i helyett azonban β_i vonalmenti feszültség, Ω helyett pedig a^2 helyettesíthető be:

$$\mu_h - \mu_\infty = \frac{\beta_i a^2}{h_i} \quad (2.3.8)$$

ahol $\mu_h = \bar{\mu}_h$ a lap környezetében (pl. a gőzfázisban) levő molekulák kémiai potenciálja. Egyensúly esetén a sziget alakja olyan, hogy teljesíti a

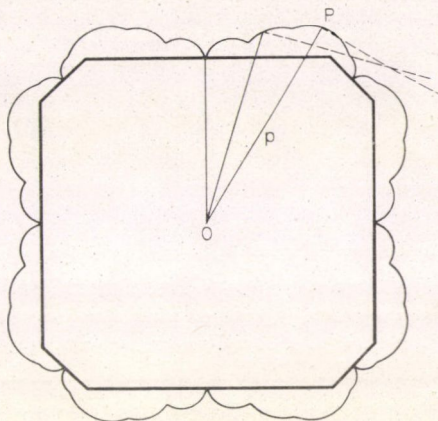
$$\int q dl = \text{minimum} \quad (2.3.9)$$

feltételt. A γ -görbéhez hasonlóan előállítható a β -görbe is, melynek segítségével a sziget vagy befejezetlen sík egyensúlyi morfológiája meghatározható. Ha felvesszük β értékeit a lépcsőirányok függvényében, akkor zárt görbét kapunk (l. pl. a 6. ábrát). A görbe egyes pontjaihoz húzott \vec{n} radiuszvektorok (pl. \vec{OP}_n) arányosak β -val, mely a radiuszvektorra merőleges irányú lépcső vonal menti feszültségének felel meg. Az egyensúlyi alakot úgy kapjuk meg, hogy a fenti merőlegesek burkológörbét megszerkesztjük [28].

Magas hőmérsékleten a lépcsőkön megjelenő kiugrások száma rohamosan nő, ami a rendezetlenség növekedésével jár. (L. 3. ábra.) Ennek az a következménye, hogy a $\beta(T)$ függvény elegendően magas hőmérsékleten állandóvá válik, azaz köralakúvá alakul.

A fenti módszerrel azonos módon megszerkeszthetők a kristályok egyensúlyi alakja is a γ -görbék segítségével, figyelembe véve a Gibbs-féle felületi energiaminimumra vonatkozó tételt (l. 2.3.6). A γ -görbe csúcsai egy-egy zónán belül kijelölik a legstabilabb kristallográfiai síkokat, ezek az ún. „szinguláris” felületek. A γ -görbe folytonos minimumhelyeinek megfelelő síkok az ún. „nem szinguláris” felületek. Az utóbbiakról meg kell jegyezni, hogy megfelelően alacsony hőmérsékleten szintén szingulárisává válnak, azaz a hozzájuk tartozó kristallográfiai síkok is megjelenhetnek a Wulff-féle egyensúlyi kristályalakon. Mivel a növekedés és lebomlás folyamatai általában nem egyensúlyi folyamatok, az egyensúlyi morfológia kialakulása az oldódás, ill. növekedés során nem általános. Brandes és Frank kimutatták, hogy a növekedési és az egyensúlyi kristályfelület szabadenergiája közötti különbség kicsivé válik, ha a kristály méretei meghaladják a néhány mikront. Ez lehetőséget nyújt arra, hogy nem szinguláris lapok is stabilan fennmaradjanak [41, 46], bár oldódás esetén a fenti jelenség alárendelt jelentőségű.

Mint az előzőekben láttuk, mind a növekedés, mind az oldódás kétdimenziós góccok keletkezésével indul meg, melyekre érvényes a (2.3.9) feltétel. Ha az a felület, melyen a nukleáció végbemegy adott hőmérsékleten a γ -görbe valamelyik minimumának felel meg, akkor a sík teljes lebomlása, ill. felépülése egy-egy elemi rétegnél mindig végbemegy. Ez azt jelenti, hogy az átmenetileg megjelenő egyéb síkok (pl. az oldódási góccok falai) igen gyorsan eliminálódnak instabilitásuk következtében. A Wulff-felület maga mindig stabilabb, mint az azonos közepes orientációjú hegy-völgy struktúra. Ezzel szemben olyan felület, mely nem szinguláris, mindig instabilabb, mint egy hegy-völgy morfológia, melyet szinguláris síkok borítanak. Ez az oka annak, hogy ha a felületen a 7a. ábrán látható hegy-völgy morfológia stabilizálódik és a felületen fellelhetők a közepes (hkl) orientációnak megfelelő lapok is, ez azt jelenti, hogy mind a (hkl), mind a hegy-völgy szerkezethez tartozó egyéb ($h'k'l'$) síkok szinguláris síkok. Ha a (hkl) orientáció nem található meg a felületen, ez azt jelenti, hogy a lap átlagos orientációja nem szinguláris orientáció.



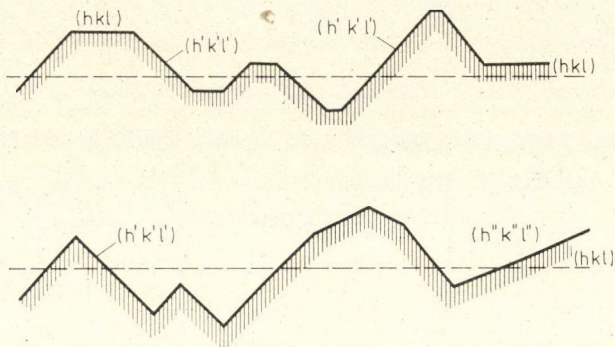
6. ábra. β vonal menti feszültség irányfüggése. Az \vec{r}_i radiuszvektorok végpontjaira emelt merőlegesek szaggatott vonallal vannak bejelölve

Mint az előzőekben már láttuk, a hőmérséklet növekedésével γ orientációfüggése csökken. Ha az orientációfüggés kvalitatív jellemzésére bevezetjük a

$$\Delta\gamma = \gamma(\bar{n}_{\max}) - \gamma(\bar{n}_{\min}) \quad (2.3.10)$$

mennyiséget, akkor

$$\lim_{T \rightarrow T_k} \Delta\gamma = 0 \quad (2.3.11)$$



7. ábra. A (hkl) átlagos orientációjú lapon fellépő struktúrák.
a, (hkl) és $(h'k'l')$ szinguláris felületek
b, csak a $(h'k'l')$ és $(h''k''l'')$ szinguláris felületek

\bar{n}_{\max} és \bar{n}_{\min} a maximális és minimális felületi energiához tartozó rádiuszvektorok a γ görbén, T_k pedig az a hőmérséklet, ahol a $\gamma(\bar{n}) = \text{konst.}$ összefüggés már érvényesül.

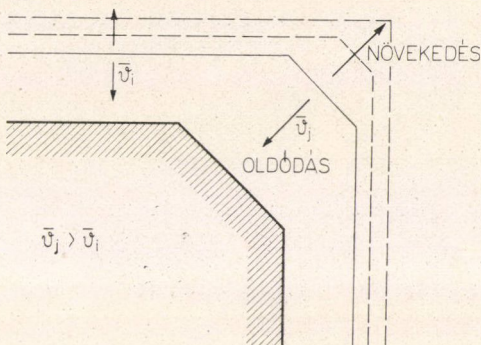
Ha megszerkesztjük adott T hőfokon az egyensúlyi kristályalakokat, jól látható, hogy $\Delta\gamma$ csökkenésével az egyensúlyi kristályalak csúcsai legömbölyödnek. Ennek az a következménye, hogy az ívszakaszhoz tartozó bármely érintőleges síkfelület stabil. Ez azt jelenti, hogy azok a kristályok, melyek magasabb hőmérsékleten keletkeznek, mindig gazdagabbak felületi morfológiájukban, mint az azonos, de alacsony hőfokon keletkezett kristályok.

Ha egy kristály nem egyensúlyi körülmények közé kerül, olyan folyamatok indulnak meg, melyek az egyensúlyi irányba tolják el a rendszert. Ez rendszerint alakjának, ill. felületi morfológiájának megváltozásával jár, mivel ilyen esetekre (2.3.2) nem teljesül. Ha a kristályt borító lapok nem szinguláris felületek, a kristály (esetleg térfogatának megtartása mellett) igyekszik olyan alakot felvenni, mely megközelíti a Wulff-féle egyensúlyi formát. A környezet és a kristályfelületek közötti jelentős, $\Delta\mu$ kémiai potenciálkülönbség esetén a kristály $\Delta\mu$ előjelétől függően az egyensúlyi alakot növekedéssel, ill. oldódással vagy lepárolgással közelítheti meg. Ha a felülettel érintkező közegben a kristály A anyagának koncentrációja (vagy parciális nyomása) C_A , a közeg telítési koncentrációja A -ra az adott feltételek mellett C_0 , akkor $\Delta\mu$ értéke

$$\Delta\mu = kT \ln \frac{C_A}{C_0} \quad (2.3.12)$$

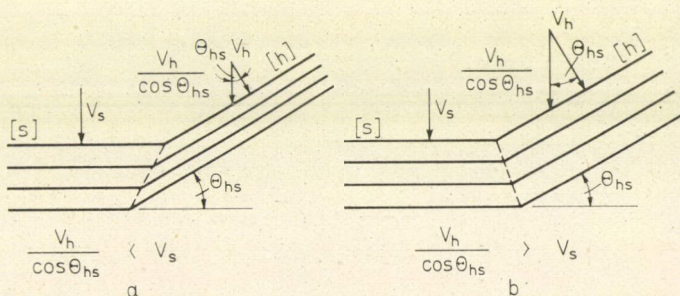
$\Delta\mu > 0$ esetén a kristály növekedni, $\Delta\mu < 0$ esetén oldódni, ill. párologni fog. A fenti folyamatok eredménye gyakran az előbbieken megemlített hegy-völgy morfoló-

gia lesz. Bizonyítható, hogy az ilyen felületi szerkezet fellépése csak igen kevésbé függ a reális szerkezettől, pl. a diszlokációktól, és elsősorban makroszkópos termodinamikai stabilitási tényezőktől függ [42]. $\Delta\mu < 0$ esetén erős eltérések tapasztalhatók a kristály különböző síkjainak oldódásában, ami arra vezethető vissza, hogy 2.3.2 nem teljesül. A kísérletek azt mutatták, hogy a maratási sebességek orientációfüggése miatt egy olyan poliéderez egyensúlyi forma jön létre, melyet a maximális sebességgel oldódó lapok borítanak. Ez olyan kristályoknál, ahol poláris jelenségek nem lépnek fel, tökéletesen megfelel a növekedés fordítottjának, mint az a 8. ábrán látható. Poláros kristályoknál, ahol az egyes kristallográfiai síkokban eltérő kémiai természetű atomok vagy ionok helyezkednek el, a fenti viszonyok maratásnál eltorzulhatnak, ha a maratószer affinitása a különböző komponensekhez különböző. A nem poláros rácsokra jó példa a Ge, melynek maratásakor $\{110\}$ síkokkal borított dodekaéder keletkezik. Ha Ge-ben félgömb alakú üreget maratunk, akkor a 8. ábrából láthatóan a lassan oldódó lapok fognak dominálni, azaz az $\{111\}$ és $\{100\}$ lapok [42].



8. ábra. Egyensúlyi kristályalak kialakulása eltérő oldódási (növekedési) sebességű kristálylapok esetén

Általánosan megfogalmazva: konkáv felületen a maratási sebesség minimumához tartozó síkok alakulnak ki, konvex felületeken ennek az ellenkezője teljesül. Ez az ún. Batterman-féle reciprocitási szabály [42].



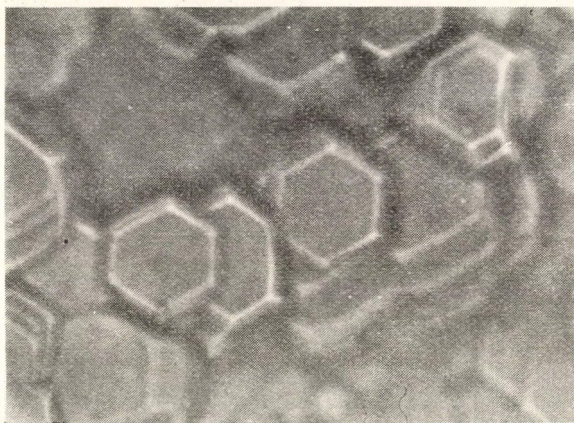
9. ábra. A felületi morfológia változása maratás során: a) A $\langle hkl \rangle$ átlagos orientációhoz tartozó \bar{v}_s maratási sebesség maximális, ezért a hegy-völgy szerkezet maratás során egyre kifejezettebbé válik. b) \bar{v}_s minimum, és ezért az egyes kiemelkedések gyors érintőleges oldódása miatt a felületi egyenetlenség csökken

Ha a felület eredetileg is több síkot tartalmazott (hegy-völgy szerkezet), maratás során ezek egy része eltűnhet, és új síkok megjelenése is előfordulhat. Az előzőeknek megfelelően jelöljük $\langle hkl \rangle$ -nek az átlagos orientációt és $\langle h'k'l' \rangle$ -nek a domborulatokat

borító síkokat. A (hkl) -hez tartozó normális maratási sebesség legyen \bar{v}_s , a $(h'k'l')$ normális maratási sebessége pedig \bar{v}_h , a két sík közötti szög a 9. ábrának megfelelően legyen Θ . Az ábrából jól látható, hogy \bar{v}_s és \bar{v}_h $\langle hkl \rangle$ irányú komponensének viszonyától függően változik a felület egyenletlensége a maratás során. Ha

$$\bar{v}_s > \frac{\bar{v}_h}{\cos \Theta} = \bar{v}_h \sec \Theta \quad (2.3.13)$$

egyenlőtlenség teljesül, akkor a (hkl) gyors maródása miatt a felület egyenletlensége a maratás során egyre nő. Egy ilyen felület látható a 10. ábrán, mely hexagonális



10. ábra. Hexagonális ZnS kristály polírozott bázislapja hosszabb maratás után. Maratószer krómkénsav, maratás 80 °C-on 30'-ig

ZnS egykristály bázislapját ábrázolja polírozás és hosszabb ideig tartó krómkénsavas maratás után. Ha $\bar{v}_s < \bar{v}_h \sec \Theta$, akkor a kiemelkedések nagy érintőleges oldódása miatt a felület egyenletlensége a maratás idejével állandóan csökken. Ez az eset felel meg a kémiai polírozásnak.

Ha két különböző típusú sík metszésénél a keresztmetszet konkáv, a reciprocitási feltételnek is teljesülnie kell. Ez azt jelenti, hogy nem lehet (hkl) és $(h'k'l')$ között olyan orientáció, melynek oldódási sebessége kisebb, mint ezek bármelyike. Ha ilyen lenne, stabilabb léven mint a fenti

két sík, megakadályozná mind a (hkl) , mind a $(h'k'l')$ orientációjú lapok növekedését. A fentiek alapján annak általános feltétele, hogy egy (hkl) síkon egy ettől eltérő, $(h'k'l')$ orientációjú sík fennmaradjon maratás során az, hogy

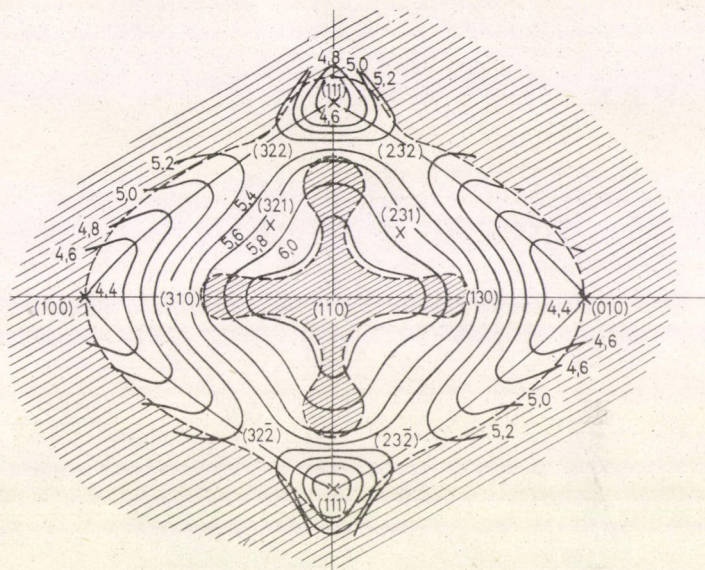
a) $\bar{v}_h \sec \Theta < \bar{v}_s$,

b) \bar{v}_h -nak nagyobbnak kell lennie konvex felület esetén, mint a (hkl) és $(h'k'l')$ közé eső orientációjú lapok \bar{v}_j maratási sebességének bármelyike. Konkáv felületekre a fordított feltételnek kell teljesülnie [42].

Irving a fenti Batterman-féle feltételekhez egy harmadikat is hozzáfűzött: stabil kiemelkedések csak akkor keletkezhetnek a (hkl) síkon, ha valamennyi borítólapjukon azonos a maratás sebessége. Ha csak kis különbség is fellép, gerincszerű képződmény alakul ki, melynek oldalait a gyorsabban oldódó lapok adják [43].

Az elmondottak igen jól szemléltethetők a Ge példáján. Ábrázolva a Ge maratási sebességének \bar{n} függését egy olyan felületet kapunk, melynek (110) síkra való vetülete látható a 11. ábrán. Felismerhető, hogy az (110) sík oldódási sebessége maximális, ezért a fenti felületen a Batterman-féle első feltétel teljesül. Megvizsgálva a felület AB metszetét ($[1\bar{1}0]$ zóna) az is kitűnik, hogy mivel a $\{322\}$ síkok a fenti felület nyeregponjtjainak felelnek meg, ezekre a Batterman-féle második feltétel is teljesül, azaz ezen lapok maratáskor (110) felületeken stabilak. Ez kísérletileg is

bizonyítható [42-3]. Az (110) felületen levő (322) és (23 $\bar{2}$) lapok a közük eső összes orientációhoz képest maximális maratási sebességet mutatnak, ezért olyan stabil konvex metszés lehetséges közöttük, mint a (322) és (110) lapok között, azaz mindkét lap fellép a kiemelkedéseken [43]. A (322) és (32 $\bar{2}$) lapok metszését vizsgálva az látható, hogy a fenti lapokon a maratás sebességének lokális minimuma van, ezért ez



11. ábra. Ge maratási sebességének orientációfüggése az (110) síkra vetítve.
A bevonalozatlan területen lehetségesek stabil oldalfelületek

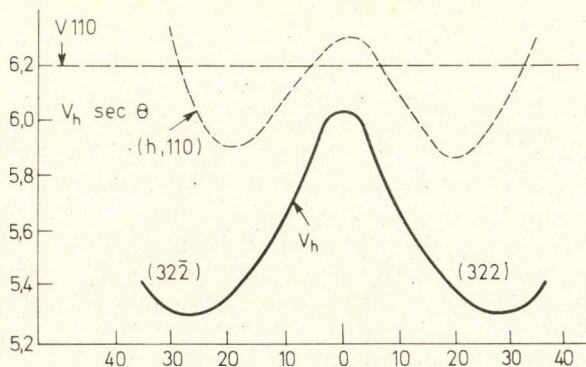
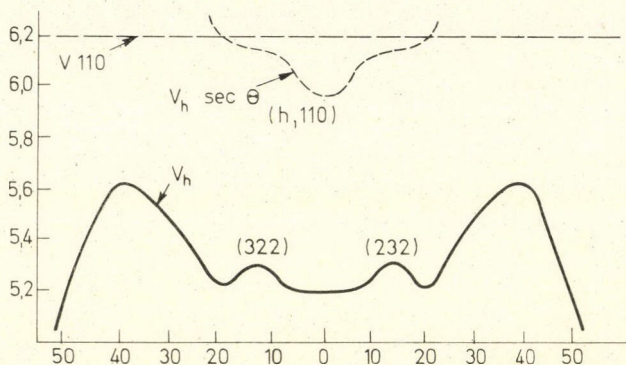
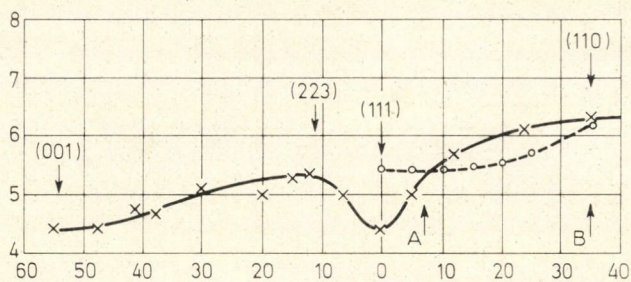
a metszés instabil, és az elméletnek megfelelően nem jelenik meg a Ge (110) felületeken. A (320) sík megjelenését az gátolja, hogy $\bar{v}_{(110)} \sec \Theta < \bar{v}_{(110)}$ azaz az első Batterman-féle feltétel nem teljesül. Mindez jól látható a maratási sebességekhez tartozó felület megfelelő metszeteiből, melyeket a 12. ábrán tüntettünk fel.

Az előző módszer mellett az oldódási morfológia meghatározására felhasználható az ún. „maratási hatásminimum” elve is [44]. Ebben az oldódási sebességvektort használhatjuk fel, melynek polárdiagramja az ún. oldódási görbe. A maratási hatásminimum elve a Gibbs-tétel analógja. Lényege az, hogy rögzített térfogat esetén

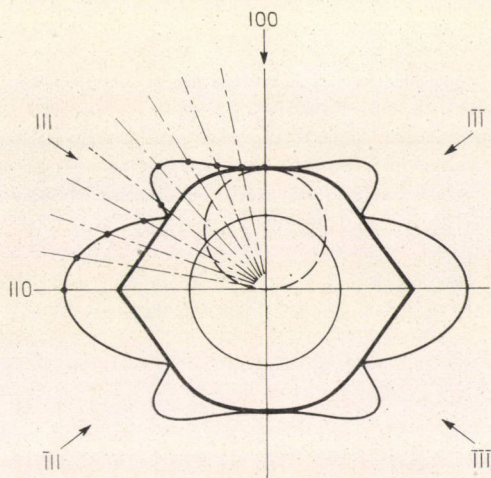
$$\sum_i \bar{v}_i dA_i = \text{minimum} \quad (2.3.29)$$

feltételt az egyensúlyi alak elégíti ki, ahol v_i az i -edik felület oldódási sebességvektora. Az egyensúlyi alak szerkesztése azonos a Wulff módszernél ismertetett eljárással. Az oldódási görbe megfelelő pontjaira mutató rádiuszvektorok végpontjára merőlegeseket emelünk. Az egyensúlyi alak metszetét azon pontok összessége adja, melyek az origóból elérhetők anélkül, hogy metszenénk a fenti merőlegeseket [28, 44].

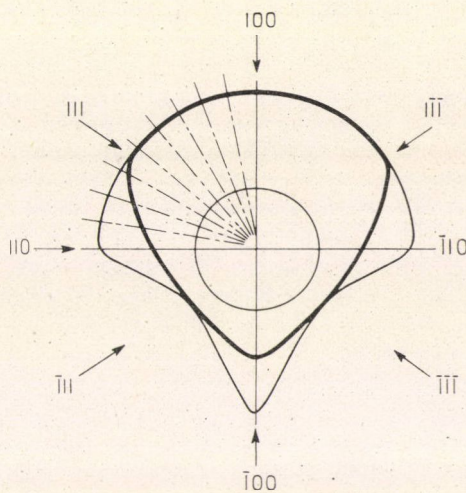
A Batterman-féle feltételek az oldódási diagram alapján is megfogalmazhatók. Az oldódási diagram (hkl)-nek megfelelő pontjához húzott rádiuszvektor végpont-



12. ábra. Ge maratási sebességének és $\bar{v}_k \sec \theta$ -nak a változása különböző kristallográfiai zónák mentén. Az a, ábra a 11. ábra adatai alapján az AB metszetnek, a b, ábra a CE metszetnek, a c ábra a CD metszetnek felel meg



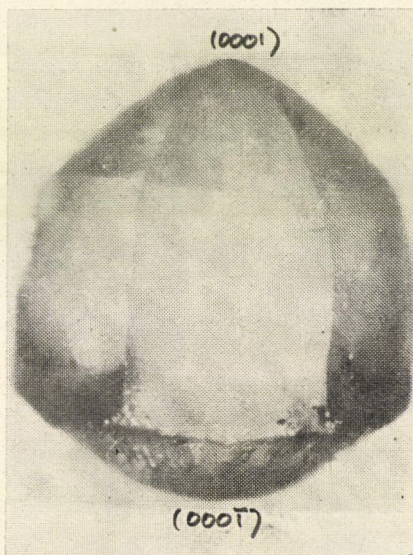
13. ábra. Ge üreg egyensúlyi maratási alakjának szerkesztése a „maratási hatásminimum” elve alapján. A vékony vonallal jelzett görbe, az oldódási sebesség polardiagramja az $\langle 110 \rangle$ zónatengely körül. A vastag vonallal kihúzott görbe az egyensúlyi alaknak felel meg



14. ábra. InSb üreg maratási alakjának kialakulása az oldódási görbe alapján $\langle 110 \rangle$ zónájú, félgömb alakú üreg esetén. (Marató-szer: $\text{HF} + \text{H}_2\text{O}_2 - \text{H}_2\text{O}$ elegy) A vékony vonallal kihúzott görbe az InSb oldódási görbéje az $\langle 110 \rangle$ zónatengely körül. A vastag vonal az egyensúlyi alaknak felel meg

jára emelt merőleges és a $(h'k'l')$ pontra mutató rádiuszvektor metszéspontjának az oldódási diagramon belül kell lennie ahhoz, hogy a $(h'k'l')$ stabil legyen egy (hkl) felületen, ui. csak így teljesül a reciprocitási feltétel. Azon $(h'k'l')$ síkok kiválasztása, melyek a Batterman—Irwing feltételeket teljesítik, a fentiek ismeretében az oldódási diagram maximum, ill. minimumhelyeinek vizsgálatára korlátozódik, figyelembe véve a Batterman-féle második feltételt.

Ott, ahol az oldódási diagram folytonos és lassan változó minimumot tartalmaz, az egyensúlyi felületek legömbölyödése várható. A γ görbe hasonló viselkedése alapján Herring az adott felület legömbölyödésének szükséges és elégséges feltételét abban határozta meg, hogy a γ görbe folytonos és differenciálható legyen, és a kérdéses ponton, valamint az origón át húzott kör sehol se metssze a γ -görbét. A fentieket Ge esetére a 13. ábra mutatja be [44].



15. ábra. CdS egykristály egyensúlyi maratási alakja. (Maratószer koncentrált HNO_3)

Nem poláros anyagoknál, mint pl. a Ge esetén az oldódási diagram szimmetrikus mind a négy síknegyedben. Az alakot meghatározó síkok az oldódási diagram szélsőértékeinél lépnek fel, és a szélsőérték érintője és az \bar{r} rádiuszvektorra merőleges egyenes azonosak. Poláros anyagoknál, ahol az egyes krisztallográfiai síkokban eltérő kémiai természetű komponensek vannak, (2.3.2) szükségképpen csak akkor teljesülhet, ha a különböző alkotóból álló síkok különböző orientációjúak, azaz az oldási diagram a poláros irányokban aszimmetrikus. Kőbös szfalerit rácsonál ilyen poláros irányok a $\langle 111 \rangle$ irányok, míg hexagonális, wurtzit típusú rácson a $\langle 0001 \rangle$ mutat poláros jelleget. Az ide sorolható legfontosabb anyagok az $A^{III}B^V$ és $A^{II}B^{VI}$ típusú félvezető vegyületek, melyek oldódási görbéje erősen aszimmetrikus. A 14. ábrán egy jellegzetes példa, a szfalerit rácús InSb oldódási diagramja látható [44]. Különösen nagy oldódási sebesség különbség mutatkozik az A atomokból álló (111) és ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), valamint a B atomokból álló ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) és ($\bar{1}\bar{1}1$) síkok között. Az aszimmetria miatt az eredményül adódó egyensúlyi üreg-alak legömbölyödött háromszög alakú. A külső felületek maradásánál fellépő aszimmetria egy szép példája látható a 15. ábrán, mely HNO_3 -al maratott CdS kristály képét mutatja [45]. Látható, hogy a (0001) és (000 $\bar{1}$) felületek teljesen eltérő módon viselkednek, és az egyensúlyi formán nincs inverziós szimmetria az $\langle 0001 \rangle$ tengely mentén.

2.4. A kristályfelületek morfológiájának kvantitatív elmélete

Az előző két módszertől teljesen eltérő alapokból kiindulva Franknak sikerült az egyensúlyi oldódási alakot kvantitatív módszerek segítségével is meghatározni [46–8]. Az elmélet a Lighthill–Whitham-elméletre támaszkodik, melyet áramlási és közlekedési problémákra dolgoztak ki 1955-ben. Frank abból indul ki, hogy mind felépülésnél, mind lebomlásnál a felület adott pontján h magasságú elemi lépcsők haladnak át, és kapcsolat áll fenn a ponton áthaladó lépcsők q fluxusa, a hosszegységre eső lépcsők s száma és az x helykoordináta között.

Ha x koordinátát úgy választjuk meg, hogy iránya megegyezzen a lépcsők haladási irányával, y pedig a felület normálisának irányába mutasson, akkor a felület meredeksége

$$\theta = \frac{\partial y}{\partial x} = hs \quad (2.4.1)$$

A referenciafelületre (az átlagos orientációra) normális oldódási sebesség:

$$-\frac{\partial y}{\partial t} = hq \quad (2.4.2)$$

A vizsgált pont környezetében felírható a kontinuitási egyenlet

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.4.3)$$

mivel egy kis hosszúságtartományon belül bekövetkező változás olyan sebességgel megy végbe, mely a tartomány határán be és kilépő lépcsők számának a különbségével arányos. (Elemi lépcsők megmaradásának elve.)

Ha feltételezzük, hogy $q = q(s, x)$, akkor (2.4.3)-at szorozva

$$c = \left(\frac{\partial q}{\partial s} \right)_x = c(s, x) \quad (2.4.4)$$

értékkel, a következő kifejezés nyerhető:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.4.5)$$

Ez azt jelenti, hogy a c sebességgel haladó „kinematikus hullám”-ra q állandó érték, azaz az egyenletnek minden $dx = c dt$ értéke mentén a lépcsők fluxusa állandó.

A $c(s, x)$ kinematikus hullámsebesség a $q-s$ görbe meredekségének felel meg x állandó értékénél. (Kleitz—Seddon-törvény.) Egy adott pont közepes sebessége (egy individuális lépcső sebessége)

$$v = \frac{q}{s} \quad (2.4.6)$$

és

$$c = \frac{d}{ds}(vs) = v + s \frac{dv}{ds} \quad (2.4.7)$$

Ha $c > v$, akkor a közepes sebesség nő a koncentrációval, — ha $c < v$ — csökken. A

$$\frac{dx}{dt} = c = \left(\frac{\partial q}{\partial s} \right)_x \quad (2.4.8)$$

feltételt kielégítő meredekségű egyenes sereg képezi a (2.4.3) egyenlet ún. karakterisztikáit. Geometriailag az egymást követő időkhöz tartozó $y = y(x)$ profilok egy $y = y(x, t)$ felületet definiálnak. A fenti karakterisztikák ezen felülethez tartozó vonalak (x, t) síkon képezett vetületei. Az (x, y) síkra képezett vetületeket a

$$\frac{\partial y}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{dt}{dx} = h \left(s - \frac{q}{c} \right) \quad (2.4.9)$$

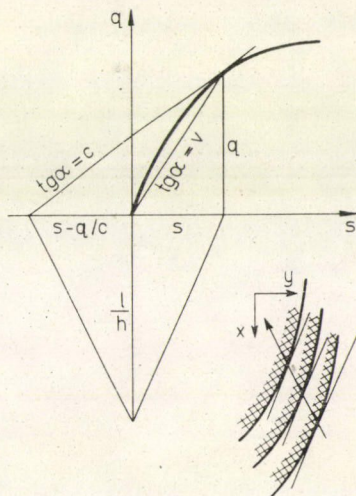
egyenlet segítségével határozhatjuk meg.

Ábrázolva $q-t$ s függvényében, a kristály felületén levő, adott orientációjú pont „oldódási pályája” megszerkeszthető. A szerkesztés menetét a 16. ábrán tüntettük fel.

A fenti jelölések felhasználásával a makroszkópos felületre normális oldódási sebesség

$$\bar{v}_s = \frac{a}{(1 + h^2 s^2)^{1/2}} \quad (2.4.10)$$

A \bar{v}_s vektor reciprokát reluktancia vektornak



16. ábra. Adott orientációjú felületi pont oldódási trajektoriájának szerkesztése. A vastagon kihúzott vonal felel meg az oldódási pályának

nevezik. A reluktancia vektor

$$\bar{p} = \frac{1}{q} (1 + h^2 s^2)^{1/2} (hs\bar{i} - \bar{j}) \frac{1}{(1 + h^2 s^2)^{1/2}} = \frac{1}{q} (hs\bar{i} - \bar{j}) \quad (2.4.11)$$

ahol \bar{i} és \bar{j} az x , ill. y irányba mutató egységvektorok. A \bar{p} vektor polárdiagramjának érintője egy adott pontban

$$\bar{e} = \frac{d\bar{p}}{ds} = -\frac{1}{q^2} \frac{dq}{ds} (hs\bar{i} - \bar{j}) + \frac{1}{q} h\bar{i} = -\frac{1}{cq^2} \left\{ h \left(s - \frac{q}{c} \right) \bar{i} - \bar{j} \right\} \quad (2.4.12)$$

és a dy/dx -nek megfelelő oldódási trajektória vektora

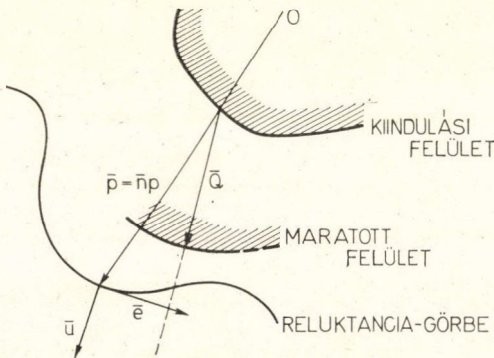
$$\bar{Q} = \bar{i} + h \left(s - \frac{q}{c} \right) \bar{j} \quad (2.4.13)$$

Könnyű belátni, hogy \bar{e} és \bar{Q} ortogonálisak, amiből a Frank-elmélet egy másik lényeges következménye adódik. Ha polárdiagramban ábrázoljuk a reluktancia-vektorokat, akkor adott orientációnál egy felületi pont trajektóriája párhuzamos a polárdiagram megfelelő pontjának normálisával.

A fentiek alapján a Frank-elmélet két alaptétele a következőképpen fogalmazható meg: Ha az oldódás (vagy növekedés) sebessége egy kristály felületein csak az orientáció függvénye, akkor egy meghatározott felületi pont oldódási pályája a térben egyenes. Ezen egyenesek iránya az ún. reluktancia-görbéből határozható meg. A reluktancia-görbe zárt alakzat, és minden pontján

$$\bar{P}_n = p\bar{n} \quad \text{ahol} \quad p = \frac{1}{v_n} \quad (2.4.14)$$

\bar{n} az adott pont irányába mutató egységvektor, v_n pedig a ponthoz tartozó maratási sebességvektor nagysága.



17. ábra. Kétdimenziós Frank model. \bar{p} vektor az ún. reluktancia vektor, az oldódási sebességvektor reciproka. \bar{e} a reluktanciagörbe érintőjének irányát, \bar{n} vektor a görbe normálisának irányába mutató egységvektort jelöli. A \bar{q} vektor adja a felületi pont térbeli elmozdulását a maratás t pillanatában

Frank második tétele értelmében az oldódási trajektória ortogonális a reluktancia-diagram adott pontjának érintőjére. Az utóbbi egyenértékű azal, hogy a maratás különböző fázisaiban egy adott kristályfelület térbeli helyét meghatározó \bar{Q} vektor párhuzamos a reluktancia görbe adott pontjának a normálisával. \bar{Q} iránya természetesen azonos a trajektória irányával, és végpontja a kiindulási felületen van. A fentiek kétdimenziós alkalmazását mutatja a 17. ábra.

Ha két vagy több oldódási trajektória metszi egymást, orientációs diszkontinuitás; kristályél keletkezik. Kimutatható, hogy ha \bar{Q} a kristály élének egy pontjára mutat, akkor a pont oldódási pályája párhuzamos az él két

oldalán levő \bar{p}_1 és \bar{p}_2 reluktancia vektorok végpontjait összekötő húr normálisával. Mivel a diszkontinuitás pályáját az (x, t) síkon (2.4.8) alapján a

$$\frac{dx}{dt} = \frac{q_2 - q_1}{s_2 - s_1} \quad (2.4.15)$$

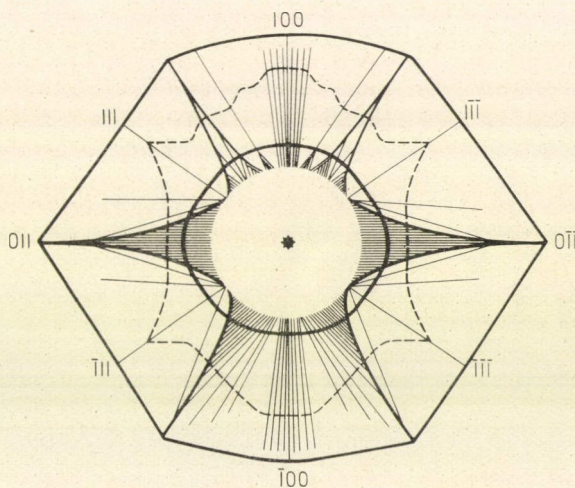
meredekségű egyenes írja le, ahol q_1 és q_2 a diszkontinuitás két oldalán levő fluxusok, s_1 és s_2 pedig a megfelelő lépcsőkoncentrációk. A pályát az (x, y) síkban a

$$\frac{dy}{dx} = hs_1 - q_1 \frac{s_2 - s_1}{q_2 - q_1} = hs_2 - q_2 \frac{s_2 - s_1}{q_2 - q_1} \quad (2.4.16)$$

egyenlet adja meg, (2.4.9)-nek megfelelően.

A fentiek alapján a teljes maratási alak meghatározásánál úgy járunk el, hogy felvesszük a kiindulási kristályalak (v. üreg) egy jellegzetes metszetét, és megszerkesztjük hozzá a reluktanciagörbét. A kiindulási felület vizsgált pontjára mutató \bar{r}_p rádiuszvektort addig hosszabbítjuk, míg metszi a reluktanciagörbét. A kimetszett ponthoz megszerkesztjük a görbe \bar{n}^* normálisát. Ez, Frank második tétele értelmében meghatározza az \bar{r}_p^0 rádiuszvektorú pont oldódási trajektóriájának irányát. Magát az oldódási pályát úgy kapjuk meg, hogy a kiindulási felület \bar{r}_p -nek megfelelő pontjából \bar{n}^* -al párhuzamost húzunk. Attól függően, hogy belső (üreg) vagy külső felületek maratásáról van szó, az oldódási pályákat a kiindulási felülettől kifelé, vagy a polárdiagram közép-pontja felé húzzuk. Ahol a trajektóriák metszik egymást, ott él keletkezik. A metszéspont után a pályákat már nem kell folytatni, és az él pontos orientációját az él két oldalán levő síkok reluktancia vektorainak segítségével határozhatjuk meg az ismertetett módon. Mivel \bar{Q} vektor nagysága az idővel arányosan változik, az egyes t pillanatokban a maratási alak úgy határozható meg, hogy az azonos időpontokhoz tartozó \bar{Q} vektorok végpontjaira merőlegeseket húzunk. Ezek burkológörbéje szolgáltatja t pillanatban az oldódó kristály megfelelő metszetét.

Felhasználva [42] adatait, az elmondottak igen jól bemutathatók a Ge példáján [48]. A 18. ábra egy $\{110\}$ síkon levő, félgömb alakú Ge üreg maratási alakjának változását mutatja két különböző pillanatban. A kialakuló felületek a kísér-



18. ábra. Ge üreg egyensúlyi maratási alakjának szerkesztése a Frank model alapján, $\{110\}$ keresztmetszetben. A szaggatott vonallal jelölt zárt görbe, a Ge reluktancia görbéje az $\{110\}$ sík mentén, a vastag vonalakkal kihúzott görbék az üreg peremének t_1 és t_2 maratási időhöz tartozó alakjai

letileg kimutatható $\{111\}$ és $\{100\}$ felületekkel azonosak. Az egyensúlyi maratási alak tökéletesen megfelel a maratási hatásminimum elve alapján szerkesztett egyensúlyi alaknak, melyet a 13. ábrán tüntetünk fel.

A fenti elmélet nem veszi tekintetbe a mikroszkópos fluktuációkat, melyek adott körülmények között annyira felerősödhetnek, hogy makroszkópos, ún. „párkányokat” (ledge) hozhatnak létre. Ezek a h elemi lépcsőmagasság sokszorosát kitevő lépcsők már nem a h -nak megfelelő sebességgel mozognak, ezért hatásukat az elmélet nem tudja figyelembe venni. A szükséges kiegészítések Mullin és Hirth [49] nevéhez fűződnek, akik az egyes, individuális lépcsők és közvetlen szomszédaik kölcsönhatását vették figyelembe. A lépcsők sebességét a lépcső előtt és mögött haladó lépcsőtől való távolság függvényében állították elő

$$\begin{aligned} \vdots \\ \bar{v}_n &= f(d_n) + f(d_{n-1}) \\ \bar{v}_{n+1} &= f(d_{n+1}) + f(d_n) \\ \vdots \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

típusú, végtelen tagból álló függvénysorozat formájában. (A d a lépcsők közötti távolság.) Az $f(d)$ függvények a lépcsők mindkét oldalán azonos típusúak, és a lépcsők közötti kölcsönhatást tükrözik. Meghatározásuk a kísérleti adatokból lehetséges azzal a feltételezéssel, hogy egy \bar{d} átlagos lépcsőtávolságú és egy egységesen d lépcsőtávolságú felület egyenértékű egymással. A kísérleti adatok alapján a

$$\bar{v} = 2f(\bar{d}) \quad (2.4.18)$$

egyenlet segítségével, gépi, iterációs módszerrel a felület időbeli változása kiszámítható.

3. Kristályfelületek szelektív maratása

3.1. A maratási gödrök keletkezésének okai

Ha egy kristály felületére diszlokációk bukkannak fel, akkor a 2.2. fejezetben ismertetett gócképződés nem véletlenszerű, és az oldódási göcök nagy valószínűséggel a diszlokáción keletkeznek. Ha a felület érintőleges oldódási sebessége \bar{v} , nem túlságosan nagy, a diszlokáció és a felület metszéspontján létrejövő gyors és ismétlődő nukleáció gödröket hoz létre; ezek az ún. maratási gödrök. Nyilvánvaló, hogy szinguláris kristályfelületeken az előzőekben ismertetett tulajdonságok miatt gödrök csak akkor jelenhetnek meg, ha a gócképződés valószínűsége a diszlokáción sokszorosán felülmúlja a spontán gócképződés valószínűségét az adott helyen. Ha nem így lenne, akkor a „megbontott” síkok gyors eliminációja miatt kitüntetett helyek nem keletkezhetnének. Mindez arra mutat, hogy a diszlokációk és a kristályfelület metszéspontja kitüntetett hely, melyen a góckeletkezés akitválsási energiájának kisebbnek kell lennie, mint a spontán magképződés esetén.

A maratási gödrök kialakulásának elméletével sokan foglalkoztak, de nagyon sok fontos probléma még ma sem tekinthető tisztázottnak. Az első magyarázatot Cabrera és munkatársai dolgozták ki [50—53] a Frank féle üregdiszlokáció modell [57] alapján. Ha egy kristályfelületen diszlokáció bukkan fel, a felület maradhat

sík, és keletkezhet egy orientációs diszkontinuitás, mely körülzárja a diszlokáció és a felület metszéspontját. Ez lehet kisebb, mint a diszlokáció hossza, de lehet a diszlokációval azonos hosszúságú üreg is a diszlokáció mentén. A Frank-elmélet az utóbbi esetre vonatkozik. Egy ilyen, ún. üreges diszlokáció energiája két részből áll: egy kapilláris járulékból és a deformációs energiából. A diszlokáció hosszegységére eső energia közelítő értéke

$$U = 2\pi r\gamma - \frac{\mu^* b^2}{4\pi k} \ln \frac{R}{r} \quad (3.1.1)$$

ahol r a diszlokáció üregének sugara, b a diszlokáció Burgers vektora, μ^* az anyag nyírási modulusa. A k állandó értéke csavardiszlokációk esetében 10, éldiszlokációknál $(1-\nu^*)$, ahol ν^* az ún. Poisson szám (a relatív harántösszehúzódnás és a megnyúlás viszonya). Az R azon henger sugara, melyben a diszlokáció energiáját vizsgáljuk (pl. a diszlokációk közepes távolságának a fele).

U értékének becslésére úgy is eljárhatunk, hogy feltételezzük az $U = U_T$ egyenlőséget, ahol U_T a rugalmas energia

$$U_T = \frac{1}{2} \sigma \varepsilon \quad (3.1.2)$$

ahol σ a feszültség, ε pedig az alakváltozás értéke. Tekintettel arra, hogy a Hooke-törvény $\varepsilon = 0,1$ fölött általában már nem teljesül, a fenti értéket felső korlátnak tekinthetjük. σ becslésénél abból indulhatunk ki, hogy

$$\sigma(x) = \frac{\mu^* b}{2\pi} \frac{1}{h} \sin \frac{2\pi x}{b} \quad (3.1.3)$$

alakú feszültségnek $\mu/2\pi$ körül van maximuma, mivel $b \approx h$; ezért (3.1.1)-ből

$$U = 2\pi r\gamma - \frac{\mu^* b^2}{4\pi k} \ln \frac{R}{r} \approx 2\pi r\gamma - \frac{R^2 \pi \mu^*}{200} \quad (3.1.4)$$

mert

$$U_T = \frac{1}{2} \cdot \frac{\mu}{2\pi} \frac{1}{10}$$

(3.1.4) természetesen csak azokra a tartományokra érvényes, ahol a Hooke-törvény is érvényben van. Ez azt jelenti, hogy a képlet csak egy meghatározott r értéken túl vehető figyelembe, ahol az r_d kritikus sugár $r_d = 5b/\pi$ [54].

A diszlokáció energiája r változásával erősen változik:

$$\frac{dU}{dr} = [2\pi\gamma - \frac{\mu^* b^2}{4\pi} \frac{1}{r}] = 2\pi\gamma - \frac{\pi\mu^*}{100} r \quad (3.1.5)$$

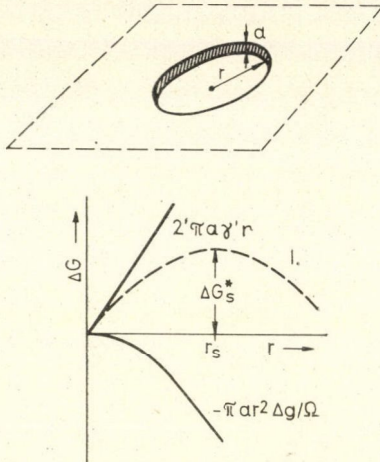
Egyensúly esetén a differenciálhányados nulla, ezért az üregdiszlokáció egyensúly sugara

$$r_d = \frac{\mu^* b^2}{8\pi^2 \gamma} \quad (3.1.6)$$

Felhasználva r_d másik értékét, és behelyettesítve (3.1.4) egyenletbe, kapjuk

$$\frac{dU}{dr} = \frac{\mu^*}{20} \left(\frac{40\pi\gamma}{\mu^*} - b \right) \quad (3.1.7)$$

Ha a zárójeles tag pozitív — azaz $40\pi\gamma/\mu^* > 0$ —, akkor a derivált pozitív. Ez azt jelenti, hogy az üreges diszlokáció energiája r minden értékére nagyobb a rendes diszlokáció energiájánál, ezért megjelenése kevésbé valószínű. A numerikus adatok ismeretében megállapítható, hogy fémek és egyszerű ionos rácsok esetén ez felel meg a reális helyzetnek. Ha az egyenlőtlenség fordított, akkor mód van r_d üregsugarú diszlokációk fellépésére. A Burgers-vektornak az a kritikus nagysága, ami felett ez már lehetségessé válik, 7–20 Å körül van [55]. Néhány esetben, b magasabb értékeinél ezek az üregek kísérletileg is észlelhetők a diszlokáció mentén [27]. Az üreg nem feltétlenül körkeresztmetszetű, és pontosabb elméleti megfontolások azt mutatják, hogy csavar-diszlokációkra az elliptikus üregkeresztmetszet valószínűbb [56].



19. ábra. Oldódási göcök keletkezésének munkája diszlokációmentes felületen. A szaggatott vonallal kihúzott görbe ΔG_s kapilláris és térfogati járulékoknak eredője

Ha az r üregsugár megváltozása a kristály növekedése, maratása vagy lepárolgása következtében lép fel, akkor (3.1.5)-öt is ki kell egészíteni azzal az energiaváltozással is, mely a kristályos állapotba vagy állapotból oldott vagy gőzállapotba történő átmeneténél jelentkezik; ezért

$$\frac{dU}{dr} = 2\pi\gamma - \frac{\mu^* b^2}{4\pi} \frac{1}{r} + \frac{2\pi\Delta\mu}{\Omega} r \quad (3.1.8)$$

ahol — mint azt már előzőleg láttuk — Ω a molekula térfogata szilárd fázisban, $\Delta\mu$ pedig a kémiai potenciál megváltozása a szilárd fázis \rightleftharpoons környezet átmenetnél (l. (2.3.12)). Tekintettel arra, hogy maratásnál $C_0 \gg C$, $\Delta\mu < 0$. Ha a kristály egyensúlyba jut a környezettel, a derivált ismét nullává válik. Mivel (3.1.8) szemmel láthatóan négyzetes polinomja r -nek, az egyensúly esetén fellépő üregsugár

$$r_{1,2} = -\frac{1}{2} \frac{\gamma\Omega}{\Delta\mu} \pm \left(\frac{\gamma^2\Omega^2}{4\Delta\mu^2} + \frac{\mu^* b^2 \Omega}{8\pi^2 \Delta\mu} \right)^{1/2} \quad (3.1.9)$$

(3.1.9) vizsgálata azt mutatja, hogy a fenti egyensúlyi sugár szoros összefüggésben van a diszlokációmentes felületek oldódási göcaival, ui. tökéletes felületen — mint azt a 2.2. fejezetben láttuk —, az r sugarú oldódási góc keletkezéséhez szükséges munka

$$\Delta G_s = \frac{r^2 \pi}{\Omega} \Delta\mu h + 2\pi r h \gamma \quad (3.1.10)$$

ahol h a monomolekuláris lépcső magassága. ΔG_s , mint azt a 19. ábra mutatja, maximumgörbe szerint változik annak megfelelően, hogy növekvő r -eknél ΔG_s felületi és térfogati részének aránya hogyan változik: (2.2.2)-nek megfelelően

$$\varrho_s = -\frac{\gamma\Omega}{\Delta\mu}$$

ezért (3.1.9) a következő alakra hozható:

$$r_{1,2} = \frac{1}{2} \varrho_s \left[\left(1 + \frac{4r_d}{\varrho_s} \right)^{1/2} \pm 1 \right] \quad (3.1.11)$$

A (3.1.9) vizsgálatából kitűnik, hogy

$$\frac{4\mu^* b^2}{8\pi^2 \gamma} > \frac{\gamma\Omega}{\Delta\mu} \quad \text{azaz} \quad 4r_d > \varrho_s \quad (3.1.12)$$

esetén (3.1.11)-nek nincs valós gyöke, ami azzal a következménnyel jár, hogy az üreg növekedni fog egészen az észlelhetőségig, — maratási gödör keletkezik. Ha $\varrho_s > 0$, azaz $\Delta\mu > 0$, akkor az üreg bezáródásra törekszik, mivel ez hat a rendszer összenergiájának csökkenése irányába. Ha $\varrho_s < 0$, azaz $\Delta\mu < 0$, akkor az üreg addig nő, míg $r = r_d$ értéket eléri. Ahhoz, hogy az első eset következzen be, azaz maratási gödör keletkezzék, a $\Delta\mu \ll 0$ feltételnek kell teljesülnie, ilyenkor ui. a felületi energia növekedése nem tudja kompenzálni a térfogati járulékok csökkenését. Az ún. „kritikus telítetlenség”-nél, ahol

$$4r_d = \varrho_s \quad (3.1.13)$$

a kémiai potenciál megváltozása

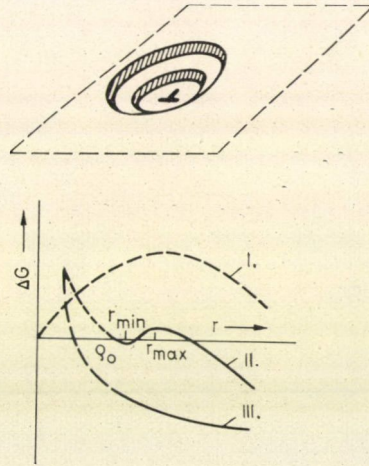
$$\Delta\mu_k = kT \ln \frac{c_k}{c_0} = \frac{2\pi^2 \gamma^2 \Omega}{\mu^* b^2} \quad (3.1.14)$$

Mint (3.1.14)-ből világosan látható, a fenti elmélet értelmében maratási gödör b kis értékeinél csak akkor keletkezik, ha γ értéke is erősen lecsökken.

A kritikus kémiai potenciálkülönbségnél (3.1.11) gyök alatti része nulla, ezért a kritikus üre sugar értékére

$$\frac{1}{2} \varrho_s = 2r_d = r_c \quad (3.1.15)$$

összefüggés adódik. A fentiek alapján ábrázolva a diszlokáción végbemenő nukleáció munkáját, a 20. ábrához jutunk. (3.1.11) gyökei a görbe maximum- és minimumhelyének felelnek meg. Ha $\Delta\mu = \Delta\mu_k$, azaz $r = r_c$, a maximum és minimum inflexió ponttá húzódik össze, és ΔG_d eltűnik. Ez azt jelentené, hogy ilyen kémiai potenciál-



20. ábra. Diszlokáción történő nukleáció munkája. A szaggatott vonallal jelölt görbe a 19. ábrának megfelelően a tökéletes felületeken keletkező góc képződésének munkája. A II. görbe a diszlokáció rugalmas energiájának változása

különbségnél a maratási gödör keletkezése nem igényel aktiválási energiát, mivel ΔG_d barrier eltűnik. A Cabrera elméletben ilyenkor a diszlokáció „spontánul felnyílik”. Minden más esetben

$$\Delta G_d = \frac{r^2 \pi h}{\Omega} \Delta \mu + 2\pi r h \gamma - E(r)h = \Delta G_s - U(r)h \quad (3.1.16)$$

ahol $U(r)h$ a diszlokáció h hosszúságú szakaszára eső sajátenergia, melyet a Cabrera elmélet (3.1.1) jobboldali kifejezésének második tagjával azonosít. Mivel $U(r) > 0$, (3.1.16) értelmében

$$\Delta G_d < \Delta G_s \quad (3.1.17)$$

azaz az oldódási göcök keletkezése szempontjából a diszlokáció és a felület metszéspontja valóban kitüntetett helyként viselkedik.

A feni modell egyik hiányossága, hogy nem veszi figyelembe a diszlokációmag energiáját. Ez különösen nagy hibát okoz akkor, ha a diszlokáció Burgers vektora, ill. q_s kicsi, mint pl. LiF esetén, ahol 5 Å nagyságrendjébe esik [53]. Mivel a diszlokációmag értéke $\sim 2-3 \bar{b}$ nagyságú, ilyen esetekre a diszlokáció magjának mérete összemérhető, ill. nagyobb q_s -nél, ami nyilvánvalóvá teszi, hogy a modell nem használható. Különösen igaz ez fémekre, ahol mind \bar{b} , mind γ szokásos értékei olyanok, hogy $q_s < 3\bar{b}$ [57–8]. A diszlokációmag szerepének tisztázására és a maghoz rendelhető

energia nagyságának meghatározására csak újabban történtek kísérletek [59–62]. Közelítésként az energia meghatározására

$$U(r_0) = \frac{\mu^* b^2}{4\pi k} h \alpha \quad (3.1.18)$$

egyenlet használható fel, ahol α értéke csavardiszlokációkra $\sim 4,5$ eldiszlokációkra 1,8–2,0 körüli érték. A diszlokáció teljes energiája hozszezegységre

$$U = \frac{\mu^* b^2}{4\pi k} \left(\ln \frac{R}{r} + \alpha \right) \quad (3.1.19)$$

21. ábra. Diszlokáción keletkező oldódási göc képződési munkája a diszlokáció-mag energiájának figyelembevételével (III. görbe.) Az I. görbe a 19. ábrának felel meg

Ha (3.1.19) alapján ábrázoljuk az oldódási göc keletkezésének munkáját, akkor a 21. ábrához jutunk. Az ábrából látható, hogy ΔG_d a ΔG_s görbéhez simulva indul, és a barrier akkor sem tűnik el, ha (3.1.15) teljesül. Ez sokkal inkább megfelel a reális helyzetnek, mint a Cabrera-modell.

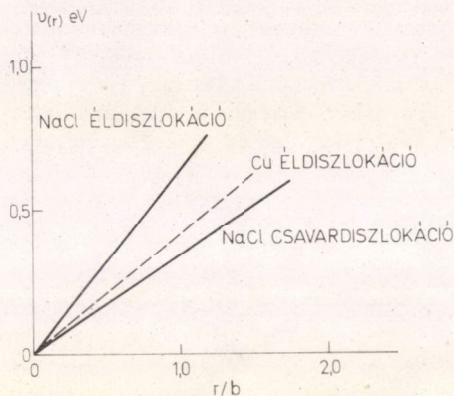
Fémeken és alkálilaloidokon végzett kísérletek azt mutatták, hogy a felszabaduló diszlokációenergia r függvényében lineáris, mint azt a 22. ábrán feltüntettük. Ilyen esetekre igen jó közelítést kapunk az

$$U = \frac{\mu^* b^2 h}{4\pi k} \alpha \frac{r}{r_0} \quad (3.1.20)$$

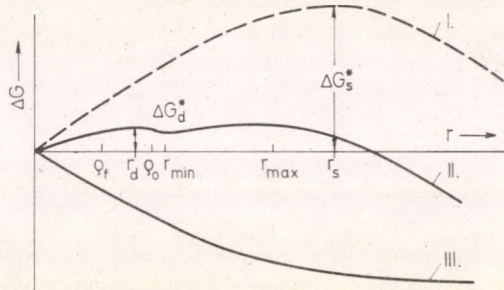
egyenlet felhasználásával, ahol r_0 a diszlokációmag sugara. (3.1.18) felhasználásával a gócképződés munkája

$$\Delta G_d = 2\pi r h \gamma - \frac{r^2 \pi h}{\Omega} \Delta \mu - \frac{\mu^* b^2}{4\pi k} h z \frac{r}{r_0} \quad (3.1.21)$$

A fenti, lineáris esetre ΔG_d menetét r függvényében a 23. ábrán tüntettük fel.



22. ábra. Kísérletileg meghatározott diszlokációenergiák változása él- és csavardiszlokációkra r/b függvényében



23. ábra. Oldódási góc képződési munkája diszlokációkon, melyek energiája r lineáris függvénye (II. görbe) A szaggatott vonallal jelzett görbe a szabad felületen történő nukleációnak, a III. görbe a diszlokáció sajátenergiájának felel meg

A kritikus mag sugara $d\Delta G/dr=0$ -nál, bevezetve a

$$p = \left(1 - \alpha \frac{r_d}{r_0}\right)^2 \quad (3.1.22)$$

jelölést

$$r_k = r_s \sqrt{p}$$

Az r_k sugarú oldódási gócok keletkezéséhez szükséges munka

$$\Delta G_d = p \Delta G_s \quad (3.1.23)$$

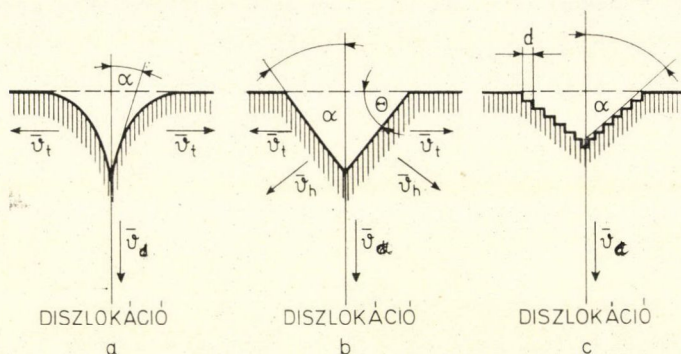
Látható, hogy ΔG_d képződési barrier csak akkor tűnik el, ha $\alpha r_d \gg r_0$, függetlenül $\Delta \mu$ értékétől. Ez lényeges különbség a Cabrera modellhez viszonyítva, ahol $\Delta \mu$ -nek a barrier megszűnésében döntő jelentősége volt. Az $r_d - r_0$, ill. az $\alpha r_d - r_0$ viszonyoknak megfelelően három eset különböztethető meg [58].

Ha $r_d/r_0 < 0,5$ és $\alpha r_d/r_0 < 1$, akkor a fenti lineáris modell igen jól használható, és ΔG_d menetének a 23. ábra felel meg. $r_d/r_0 > 0,5$ és $\alpha r_d/r_0 < 1$ esetében a (3.1.22)-nek megfelelő r_k mellett még fellép a Cabrera-féle r_{\min} és r_{\max} is, mint ez a 21. ábrán látható. $r_d/r_0 > 0,5$ és $\alpha r_d/r_0 > 1$ esetében a Cabrera modellt kapjuk, ebben az esetben ui. a diszlokáció sajátenergiájában elsősorban a rugalmas alakváltozási energia az, ami ΔG értékéhez hozzájárul.

Az első esetben a maratási gödrök sugara olyan kicsi, hogy keletkezésükkor gyakorlatilag csak a diszlokációmag energiája szabadul fel, ennek ellenére $\Delta G_d < \Delta G_s$. Ez a további esetekben még kifejezettebbé válik, ezért mindaddig a diszlokációkon keletkeznek az oldódási göcök, amíg $p > 0$.

3.2. A maratási gödrök tulajdonságai

Mint azt az előzőekben már megemlítettük, maratási gödrök diszlokációk felbukkanási pontján ismétlődő nukleációval jönnek létre. Ahhoz, hogy észlelni lehessen őket, szükséges az, hogy legalább $0,05 \mu\text{m}$ átmérőjűek és megfelelő mélységűek legyenek, továbbá, hogy a felület egyéb egyenetlenségei, a véletlen nukleációval képződő göcök stb. tehát a háttér ne zavarja lényegesen a megfigyelésüket.



24. ábra. Különböző típusú maratási gödrök. a) ún. nem preferenciális maratás, kónikus maratási gödör. b) Preferenciális maratás, a gödör falát borító síkok zárt rendszert alkotó szinguláris síkok. c) Preferenciális maratás, a gödör falát alkotó szinguláris síkok nem adnak zárt rendszert

A maratási gödrök kiterjedése, mint láttuk (3.1.9)-ből, elsősorban $\Delta\mu$ -tól függ. A maratási gödör mélységét a különböző irányú oldódási sebességek szabják meg. Az észlelhetőséghez az szükséges, hogy a különböző \bar{v}_i maratási sebességvektorok kisebbek legyenek, mint a diszlokáción fellépő \bar{v}_d , melynek iránya egybeesik a diszlokációval. Attól függően, hogy a fenti sebességek viszonya milyen, különböző esetek léphetnek fel, melyeket a következő fejezetben tárgyalunk. A sebességviszonyok értelmezése miatt a 24. ábrán három, jellegzetes esetet emelünk ki. Az a, eset az ún. „nem preferenciális maratásnak” felel meg, melyre a lehetséges irányok többségére nézve a

$$\bar{v}_i(\bar{n}) = \text{konst.} \quad (3.2.1)$$

összefüggés érvényes. A másik két eset már ún. „preferenciális” maratás, melyre $\bar{v}_i = \bar{v}_i(\bar{n})$ feltétel teljesül. Az ábrán feltüntetett \bar{v}_i a vizsgált felület irányával azonos, érintőleges maratási sebesség, míg \bar{v}_s a felületre normális sebességvektor diszlokáció-

mentes esetben (2.2.23)-nak megfelelően. A \bar{v}_t értékét, mint azt a 2.2. fejezetben láttuk, (2.2.18) alapján adhatjuk meg. Ha a diszlokáció a felület környezetében a felületre normális, akkor \bar{v}_h , a gödör falára normális vektor

$$\bar{v}_h = \bar{v}_d + \bar{v}_t \quad (3.2.2)$$

melynek nagysága

$$v_h = (v_d^2 + v_t^2)^{1/2} = v_d \sec \alpha = v_d \operatorname{cosec} \Theta \quad (3.2.3)$$

ahol α a maratási gödör csúcshöge, Θ pedig a gödör falának meredeksége. Az α , esetre α meghatározásánál úgy járunk el, hogy a kónikus gödör csúcsához érintőt húzunk. A c , esetről, mely különösen nagy Burgers vektorú csavardiszlokációk és hexagonális rácsok esetén gyakori, α a lépcsők burkoló egyenesének segítségével határozható meg. Az utóbbi esetben a meredekség

$$\Theta = \arctg \frac{b}{d} \quad (3.2.4)$$

ahol d a spirálkarok távolsága, b pedig az egyes lépcsők magassága, azaz a csavardiszlokáció Burgers vektora. A d értékére Cabrera és munkatársai [51] $19\varrho_s$ értéket adtak meg. A fentiek figyelembevételével és (2.2.2) felhasználásával

$$\Theta = \arctg \frac{b}{19\varrho_s} = \arctg \left(-\frac{b}{19} \frac{\Delta\mu}{\gamma\Omega} \right) \quad (3.2.5)$$

kifejezés adódik, azaz $\Theta \Delta\mu$ függvénye. Felhasználva pl. LiF irodalmi adatait, még $b=2 \text{ \AA}$ esetén is $\Theta \sim 2,2^\circ$ érték adódik, ami mikroszkóppal, különösen interferencia-mikroszkóppal már jól észlelhető.

Könnyű belátni, hogy Θ a maratási sebességek viszonyával is kifejezhető. Közelítőleg

$$\frac{\bar{v}_d}{\bar{v}_t} = \operatorname{tg} \Theta = g \quad (3.2.6)$$

Θ kis értékeire $g \approx \Theta$. A mikroszkóppal történő megfigyelésnél Θ , ill. g értéke korlátozott; nem lehet kisebb 0,1-nél [58]. A továbbiakban ezt az alsó korlátot g^* -gal jelöljük.

A \bar{v}_d maratási sebesség értéke \bar{v}_t és \bar{v}_s -hez hasonlóan

$$\bar{v}_d = av \exp \left(-\frac{\Delta G_d + \Delta H}{kT} \right) \quad (3.2.7)$$

ahol $v \approx 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ és ΔH a párolgási, ill. oldási hő. Felhasználva (3.1.21) és (2.2.16) egyenleteket és azt a tényt, hogy

$$\bar{v}_d \geq g^* \bar{v}_t \quad a \approx b^* \quad (3.2.8)$$

$$\exp \left(-\frac{p\Delta G_s}{kT} \right) \equiv g^* k \quad (3.2.9)$$

Mivel η telítetlenségének nagynak kell lennie ($\eta \approx 1$), a (3.2.9)-ben szereplő kitevő mindig kisebb nullánál, ezért $g^*K \leq 1$. Bevezetve a

$$\Gamma = \left(\frac{b^*}{b} \right)^{1/2} ab \frac{\gamma}{KT} \quad (3.2.10)$$

jelölést (3.2.21) és (2.2.3) egyenletek felhasználásával, figyelembe véve, hogy $b^*ba \approx \Omega$

$$\frac{1}{\Gamma^2} \frac{\Delta\mu}{KT} \cong \frac{\pi p}{\ln g^*K} \quad (3.2.11)$$

ahol Γ az ún. normalizált vonal menti energia, mely T függvénye [58]. A fenti egyenlet alapján ismerve γ és T értékeit megadható az a $\Delta\mu_M$ érték, mely az alsó határát jelenti észlelhető maratási gödrök megjelenésének.

Ha figyelembe vesszük a diszlokációmentes felületek spontán gócképződését (azaz a normális oldódás zavaró hatását) is, akkor megadható az észlelhető maratási góccok képződésének felső korlátja is. Ha a felület orientációja a 2. ábrának megfelelően Θ szöggel hajlik egy szinguláris (v. kis indexű) síkhoz képest, akkor

$$d = \frac{h}{\operatorname{tg} \Theta} \quad (3.2.12)$$

Ha a lépcsők a felületen \bar{v}_t átlagos sebességgel futnak végig, a merőleges \bar{v}_s komponens

$$\bar{v}_s = \bar{v}_t \operatorname{tg} \Theta \quad (3.2.13)$$

Tekintettel arra, hogy a maratási gödrökre teljesülnie kell (3.2.8)-nak, $\operatorname{tg} \Theta$ -nak kisebbnek kell lennie g -nél. Ez azt jelenti, hogy maratási gödrök csak akkor jelennek meg a felületen, ha ennek orientációja csak igen kis Θ -val tér el a szinguláris felületek orientációjától. Θ értéke (100) lapon AgBr esetén 5° , LiF esetére 10° . A (111) laptól való maximális eltérés szöge az utóbbi anyagra 5° , fém réz esetére pedig 3° -nál nagyobb nem lehet [19]. Érdekességgént lehet megemlíteni, hogy Si esetén Θ egészen nagy értékeket is felvehet.

Ha a diszlokációmentes felület oldódása is számottevő, a (2.2.23) egyenlet felhasználásával az észlelhetőség feltételeit (3.2.11)-hez hasonlóan fogalmazhatjuk meg. Feltételezve, hogy a telítetlenség $\eta \approx 1$ és $b^* \approx b$

$$\exp \left[\left(\frac{1}{3} - p \right) \frac{\Delta G_s}{KT} \right] > K^{2/3} \quad (3.2.14)$$

amiből [58]

$$\frac{1}{\Gamma^2} \frac{\Delta\mu}{KT} < \pi \frac{\frac{1}{3} - p}{\frac{2}{3} \ln K} \quad K > 1 \quad \text{és} \quad (3.2.15)$$

$$\frac{1}{\Gamma^2} \frac{\Delta\mu}{KT} > \pi \frac{p - \frac{1}{3}}{\frac{2}{3} \ln \frac{1}{K}} \quad K < 1 \quad \text{esetén} \quad (3.2.16)$$

Az utóbbi két egyenlet független a magképződés modelljétől. Ha $g = g^*$ esetében ábrázoljuk a $\Delta\mu/RT^2KT$ értékeket p függvényében, megkaphatjuk azokat a tartományokat, ahol maratási gödrök képződnek. A fentieket néhány jellegzetes K értékre [58] alapján a 25. ábrán ábrázoltuk. A $p = 0$ -nak megfelelő pontok a (3.2.11) egyenlet, a $p = 1/3$ -nak megfelelő pontok pedig a (3.2.15) és (3.2.16) egyenletek alapján adhatók meg. Az ábrán bevonalkázott területeken mind a (3.2.11), mind a (3.2.15–16)-nak megfelelő feltételek egyidejűleg teljesülnek. Mint látható, kis sebességi állandók esetén ($K < 1$) az észlelhető maratási gödrök keletkezésének csak egy, $\Delta\mu$ -tól függő alsó korlátja van. $K > 1$ esetére mind alsó, mind felső korlát fellép. Az ilyen nagy oldalirányú oldódási sebességek esetén van egy határ, mely

$$p_{kr} = \frac{\ln g^* K}{\ln g^{*3} K} \quad (3.2.17)$$

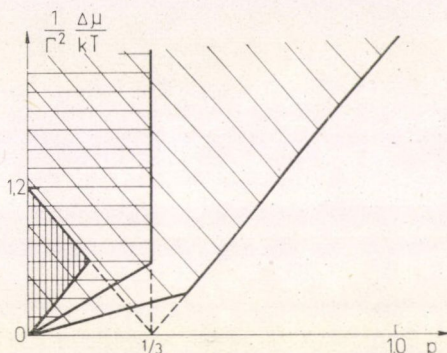
ahol p_{kr} az egyenespárok metszéspontja a $K = 1$ esetre. Ha $p < p_{kr}$, akkor jól észlelhető maratási gödrök lépnek fel. Fordított irányú egyenlőtlenségnél a háttér elfedheti a maratási gödröket. Ha $K \gg 1/g^*$, akkor a bevonalkázott terület eltűnik, és maratási gödrök nem keletkeznek.

Mint a felsorolt tényezőkből látható, aránylag sok feltételt kell ahhoz biztosítani, hogy észlelhető maratási gödrök keletkezzenek. A diszlokáció többlet-energiája önmagában még nem elegendő ahhoz, hogy ezeket a feltételeket biztosítsuk, a kinetikai paraméterek megfelelő értékeit is biztosítanunk kell. Az utóbbiak első sorban K értékén keresztül fejtik ki hatásukat, míg a diszlokáció hatása p értékében jelentkezik. A két tényező együttes hatása döntő. Aránylag kedvezőtlen, kis p értékek mellett is sikerülhet maratással diszlokációkat előhívni, ha K értékét megfelelő módon lecsökkentjük. Különösen fontos az a tényező, hogy míg p első sorban anyagi állandóktól függ, addig K külső tényezőkkel erőteljesen befolyásolható.

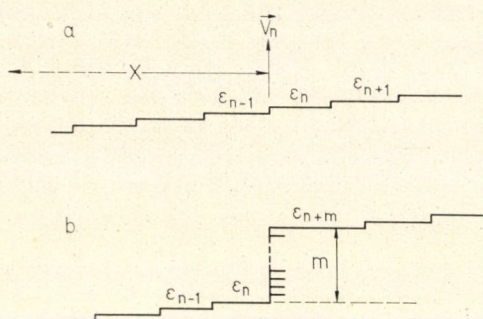
Egyszerű, elemi lépcsők esetén K értéke [58]

$$K = 2\beta \frac{X_s}{b^*} \quad (3.2.18)$$

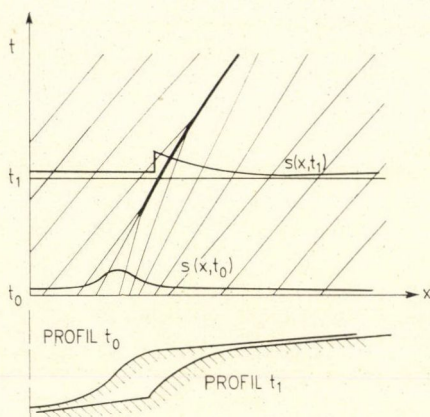
ahol X_s az atomok, ill. molekulák közepes diffúziós úthossza a környezetből a kristály felületére, ha feltételezzük, hogy a felületi diffúzió gyorsabb, mint a határrétegben végbemenő diffúzió. β egy retenciós faktor, mely az anyagtranszportban mutatkozó akadályok figyelembevételére szolgál. Ha $X_{s/b^*} \approx 10^2 - 10^4$, akkor a lépcsők mozgását az adszorbeált molekulák diffúziósebessége fogja megszabni. Mivel a molekulák koncentrációja ilyenkor a lépcsők környezetében megközelíti az egyensúlyi értéket, $\beta \approx 1,0$. Ez az eset valósul meg fémek magashőmérsékletű elgőzölésénél [12]. Ha a diffúziós tér kicsi, $X_{s/b^*} \approx 1,0$, és a felületi diffúzió szerepe elhanyagolható. A szilárd fázisból kilépő molekulák ilyenkor közvetlenül a lépcső éléről lépnek át a másik fázisba. Erre az esetre β nyilvánvalóan kisebb egynél. Ez az eset valósul



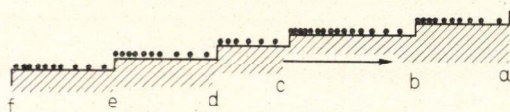
25. ábra. Észlelhető maratási gödrök fellépésének tartományai p függvényében



26. ábra. Párkány v. sokszoros lépcső
sematikus ábrája



27. ábra. Lépcsőtörlődés alakjának időbeli változása a Frank-féle kinematikus elmélet alapján. Az a, ábra az eloszlás megváltozásait, a b, ábra a profil megváltozását mutatja.



28. ábra. Adszorbeált idegen atomok hatása, lépcsők vándorlási sebessége. A h magasságú elemi lépcsők eloszlása a szaggatott vonalakkal határolt tartományon belül eltér a felület többi részétől. A felületen üllő adszorbeált atomokat pontok jelölik

meg fémek és félvezetők elektrolitikus maratásánál [58], és oldatokban történő maratásánál ($\Delta\mu \gg kT$).

Ha a rendszer olyan szennyezőket tartalmaz, melyeket a felület adszorbeál, ez rendkívül erősen befolyásolhatja a maratás kinetikáját, lecsökkentve a lépcsők haladási sebességét, ill. K -t. Ha a maródó felület különböző pontjain eltérő s lépcsősűrűség lép fel, akkor a lépcsőkön való szennyezésadszorpció a lépcsők feltorlódásához, esetleg párkányok kialakulásához vezethet. A h érték multiplikálódása β erős csökkenésére vezet, mivel a Mullins—Hirth féle elmélet értelmében [49] a 26. ábrán látható makrolépcső sebessége erősen lecsökken.

$$v = \frac{1}{m} [f(d_n) + f(d_{m+n})] \quad (3.2.19)$$

A jelenség kvalitatív modellje legegyszerűbben a Frank elmélet alapján adható meg [46]. Ha a felületen valahol (pl. a maratási gödör falánál) az átlagosnál nagyobb lépcsősűrűség áll elő, első közelítésben egy szimmetrikus eloszlású lépcsőnyaláb jön létre, melyet a 27. ábrán tüntettünk fel. Az ábra az (x, t) síkban ábrázolja a nyalábot. A karakterisztikák s kis értékeire kisebb meredekségűek a nagy s -ekhez tartozó karakterisztikáknál. A lépcsőnyaláb frontoldalán a karakterisztikák divergálnak, a hátsó oldalon konvergálnak és metszik egymást. A metszés mentén a közbeeső sűrűségértékek eltűnnek, és egy diszkontinuitás lép fel, mely a (2.4.15)-nek megfelelő sebességgel mozog a felületen. (A lökéshullámmal analóg.)

A diszkontinuitás alakja d^2q/ds^2 előjelétől függ. Negatív értékeknél a profil konvex, pozitív értékeknél konkáv lesz. A maratási gödör észlelhetősége szempontjából döntő, hogy melyik eset valósul meg. Mivel a maratási gödör falai képviselik

a lépcsőnyalábot, az orientációs diszkontinuitásnak a frontoldalon kell elhelyezkednie ahhoz, hogy a maratási gödör éle definiált és jól észlelhető legyen.

Ha szennyezések nincsenek jelen, a nyaláb, mivel $v \neq c$, a frontoldalán annyi lépcsőt veszít, mint amennyi a hátoldaláról beérkezik. Ha adszorbeálódó szennyezések vannak jelen, a fenti stationer állapot felborul. A $v = q/s$ értékét az fogja megszabni, milyen q értéke a nyaláb frontoldalán. Egy ilyen rendszer sematikus ábrája látható a 28. ábrán, ahol az egyes lépcsők adszorbeált szennyezőket tartalmaznak. A szennyezés mennyisége a felület élettartamától is függ, a hátsó élek mindig több adszorbeált atomot tartalmaznak, mint a lépcső haladása közben éppen keletkező friss felületek. Az ábrán d lépcső a többiekhez képest elmaradt, ezért egy aránylag szennyezettebb felülettel találkozik, ami erősen lefékezi. Az e lépcső kissé felgyorsulhat, mivel kisebb a kölcsönhatása a diffúziós térrel. Végeredményben c lépcső beleolvad d -be, és egy $2h$ lépcsőmagasságú párkány keletkezik. Mivel a cd lépcső most már (3.2.19) miatt is lassul, a párkány egyre magasodik, és a párkányt követő sík egyre terjedelmesebbé válik.

Mindez azt jelenti, hogy egy aránylag stabil lépcső frekvencia instabillá válik a legkisebb változásokra is szennyezések jelenlétében. Mindez igen jól tanulmányozható pl. LiF esetén, ahol Fe nyomok pl. döntő szerepet játszanak abban, hogy maratási gödör keletkezik-e, és milyen morfológiája lesz [63—68]. Ezek a szennyezők nem csak a maratószerből kerülhetnek a rendszerbe, de a diszlokáció Cotrell-felhőjéből is oldatba kerülhetnek, és kiülhetnek az elemi lépcsőkre.

3.3. A maratási gödrök morfológiája

Az előző fejezetben a 24. ábrán bemutattuk a maratási gödrök alapvető típusait. A legegyszerűbb morfológiát az ún. nem preferenciális maratásnál nyerjük, melynél a diszlokációra merőleges síkokban $\gamma(\bar{n})$, ill. $\bar{v}(\bar{n})$ állandó. Ennek az a következménye, hogy a maratási gödör kónikus. A kónikus maratási gödrök egyensúlyi alakjának tárgyalásakor abból indulhatunk ki, hogy a morfológiát a felületi energia és a rugalmas alakváltozás energiájának egyensúlya szabja meg. Az egyensúly állapotában

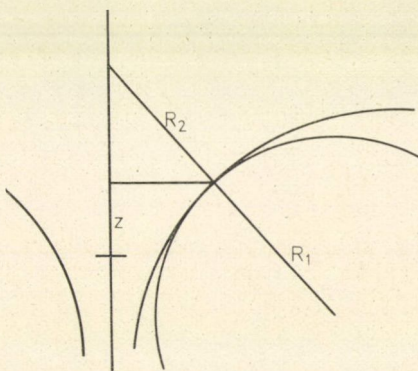
$$\gamma \left(\frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right) = E(r) = r_d \frac{\gamma}{r^2} \quad (3.3.1)$$

ahol R_1 és R_2 a gödör konkáv falának görbületét jellemző sugárértékek, r_d pedig (3.1.6)-nak megfelelően a Frank-féle üreg-diszlokáció egyensúlyi sugara. $E(r)$ az alakváltozási energia sűrűsége

$$E(r) = \frac{\mu^* b^2}{8\pi^2 r^2} \quad (3.3.2)$$

R értékeinek meghatározása a 29. ábra alapján lehetséges, felírva a görbületeket. R értékének behelyettesítése után (3.3.1) segítségével és a megfelelő egyenletek integrálásával

$$Z \approx \frac{1}{2} r_d \left(\ln \frac{r}{r_1} \right)^2 + A \ln \frac{r}{r_1} + B \quad (3.3.3)$$



29. ábra. Diszlokáció felbukkanási helyén keletkező gödör metszete. Az ábrán a felületi gödör R_1 és R_2 jellemző sugarai vannak feltüntetve

ahol r_1 állandó, melynek segítségével az $r = r_1 e^\theta$ alakra hozható. Ha figyelembe vesszük, hogy $r_d = 5b/\pi$ sugáron belül az alakváltozási energia sűrűségét állandónak tekintjük ($\mu/200$) és ennek az értéknek a felhasználásával nyerhető

$$Z = Z_0 + \frac{\mu^* r^2}{800\gamma} \quad (3.3.4)$$

egyenletnek az r_d -nél simulnia kell (3.3.3)-hoz, a Z görbe alakjára a következő egyenletet nyerjük:

$$Z = \frac{1}{2} r_d \left(\ln \frac{\pi e^{1/2} r}{5b} \right)^2 - \frac{1}{8} r_d \quad (3.3.5)$$

A fenti tárgyalás Franktól származik [54]. McLean az újabban közölt munkáiban a maratási gödör alakjának kérdését két, kör alakú hurok között kihúzott szappanbuborék alakjának problémájára vezette vissza, ahol az alakot megszabó tényező a felületi energia minimalizálása [69]. A McLean-modellben a diszlokáció egy r_d sugarú hengerrel közelíthető, mely a felületen r sugarúvá nyílik szét. A kialakuló felület r és r_d közé eső szakasza tartalmazza azt a formát, melyre egyensúly esetén

a rendszer energiája minimális. Ez a felület — a szappanbuborék modellből következően — egy katenoid, mely az

$$r = h \cos h \frac{Z}{h} \quad (3.3.6)$$

lánggörbe Z körül történő forgatásakor jön létre [70]. Az említett görbét a 30. ábrán tettük fel. A katenoid szakasz az A és B pontok közé esik. A rendszer energiája

$$U = A\gamma - l\vartheta \quad (3.3.7)$$

ahol A a katenoid felülete, ϑ a diszlokáció vonalmenti feszültsége, l pedig a maratási gödör bázisától mért távolság. Ha dl elmozdulás történik, az energia megváltozása

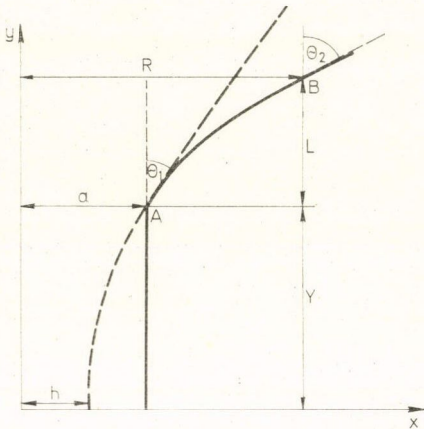
$$\frac{dU}{dl} = \frac{dA}{dl} \gamma - \vartheta \quad (3.3.8)$$

Egyensúly esetén a derivált zérus, ezért

$$\frac{dA}{dl} \gamma = \vartheta \quad (3.3.9)$$

Rögzítve r_d és R értékét, h egyedül l függvénye, ezért

$$\frac{dA}{dl} = \frac{dA}{dh} \frac{dh}{dl} \quad (3.3.10)$$



30. ábra. A diszlokáció-felület metszetének McLean modellje

és A nagyságát a forgástestek felszínének megfelelően integrálással kaphatjuk meg:

$$A = 2\pi \int_z^{z+L} h \cos h^2 \frac{Z}{h} dz \quad (3.3.11)$$

dA/dh és dh/dl differenciálhányadosok előállíthatók, és mivel $h = r_d \cos \Theta$, ahol Θ a maratási gödör csúcsszöge, ϑ értékére

$$\vartheta = 2\pi r_d \gamma \cos \Theta \quad (3.3.12)$$

összefüggés adódik. Egyenes diszlokációk esetére $U = \vartheta$, ezért (3.3.12) diszlokációk sajátenergiájának meghatározásához is felhasználható.

Az eddigiek során feltételeztük, hogy γ értéke izotróp. Ha γ anizotróp, de folytonosan változik n -nel, továbbra is kónikus maratási gödör keletkezik, de aszimmetrikus lesz. A McLean modell ennek tárgyalására is alkalmas, ha teljesül 2.3. fejezetben ismertetett Herring-féle feltétel is. Anizotróp γ esetére úgy járunk el, hogy a maratási gödör felszínét a kúppalást mentén csíkokra bontjuk, és feltételezzük, hogy az így nyert csíkok egy-egy katenoidtól származnak. Maga a maratási gödör ily módon maga is egy szabálytalan katenoidként fogható fel, melynek h paramétere nem állandó, $h = h(\xi)$, ahol ξ a maratási gödör tengelye és a palást által bezárt szög. Az egyes felületi csíkokhoz rendelhető energia

$$U_\xi = d\xi \int_z^{z+L} \gamma \cos h^2 \frac{Z}{h} dz \quad (3.3.13)$$

és (3.3.7) és (3.3.8) egyenleteknek megfelelően

$$U = U_\xi - \frac{l\vartheta}{2\pi} d\xi \quad (3.3.14)$$

$$\frac{dU}{dl} = \frac{dU_\xi}{dl} - \frac{l\vartheta}{2\pi} d\xi \quad (3.3.15)$$

és egyensúly esetén

$$\frac{\vartheta}{2\pi} = \frac{1}{d\xi} \frac{dU_\xi}{dl} \quad (3.3.16)$$

Ha az alak nem túlságosan tér el a katenoidtól, (3.3.16) jobb oldala meghatározható, és

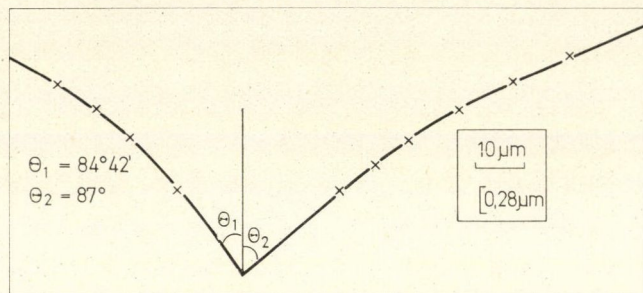
$$\frac{\vartheta}{2\pi} = \frac{1}{d\xi} \frac{dU_\xi}{dl} = \gamma_a \cos \Theta_a - \frac{\partial \gamma}{\partial \Theta} \sin^2 \Theta_a \quad (3.3.17)$$

egyenletet kapjuk [69]. Θ_a a maratási gödör csúcsához húzott érintő és a gödör tengelye által bezárt szög. γ_a általában közelíthető az eredeti felület felületi energiájával.

Az aszimmetrikus maratási gödör szembenlevő felületelemeire feltételezhető, hogy ellentétes előjelű csavaró-tagokat ($\partial\gamma/\partial\Theta$) tartalmaznak, ezért

$$\gamma \cos \Theta_1 = \frac{\partial\gamma}{\partial\Theta} \sin^2 \Theta_1 = \gamma \cos \Theta_2 + \frac{\partial\gamma}{\partial\Theta} \sin^2 \Theta_2 \quad (3.3.17)$$

ahol Θ_1 és Θ_2 a 31. ábrának megfelelő szögek.



31. ábra. Aszimmetrikus, kúp alakú maratási gödör keresztmetszete. Az aszimmetria mértéke a θ_1 és θ_2 szögek eltérése

A (3.3.17) egyenletből

$$\frac{1}{\gamma} \frac{\partial\gamma}{\partial\Theta} = \frac{\cos \Theta_1 - \cos \Theta_2}{\sin^2 \Theta_1 + \sin^2 \Theta_2} \quad (3.3.18)$$

ahol a Θ értékeket kísérleti úton (pl. interferencia-mikroszkóppal) könnyen meghatározhatjuk.

Szimmetrikus metszetekre a csavarási tag értéke nyilvánvalóan nulla.

Ha a Herring-feltétel nem teljesül, azaz a γ görbe a vizsgált rendszerben nem folytonos és differenciálható, akkor a maratási gödrök falai a kristály szimmetriáit fogják tükrözni. Ez az ún. preferenciális maratás. Ha a kristály olyan, hogy szinguláris síkjai zárt rendszert alkotnak, akkor nyerhető a 24.b ábrán látható maratási gödör-alak. Ilyen zárt rendszert képeznek pl. az $\{111\}$ síkok köbös rácsban. Ezekre az esetekre

$$\bar{v}_d > \bar{v}_h \cong \bar{v}_s$$

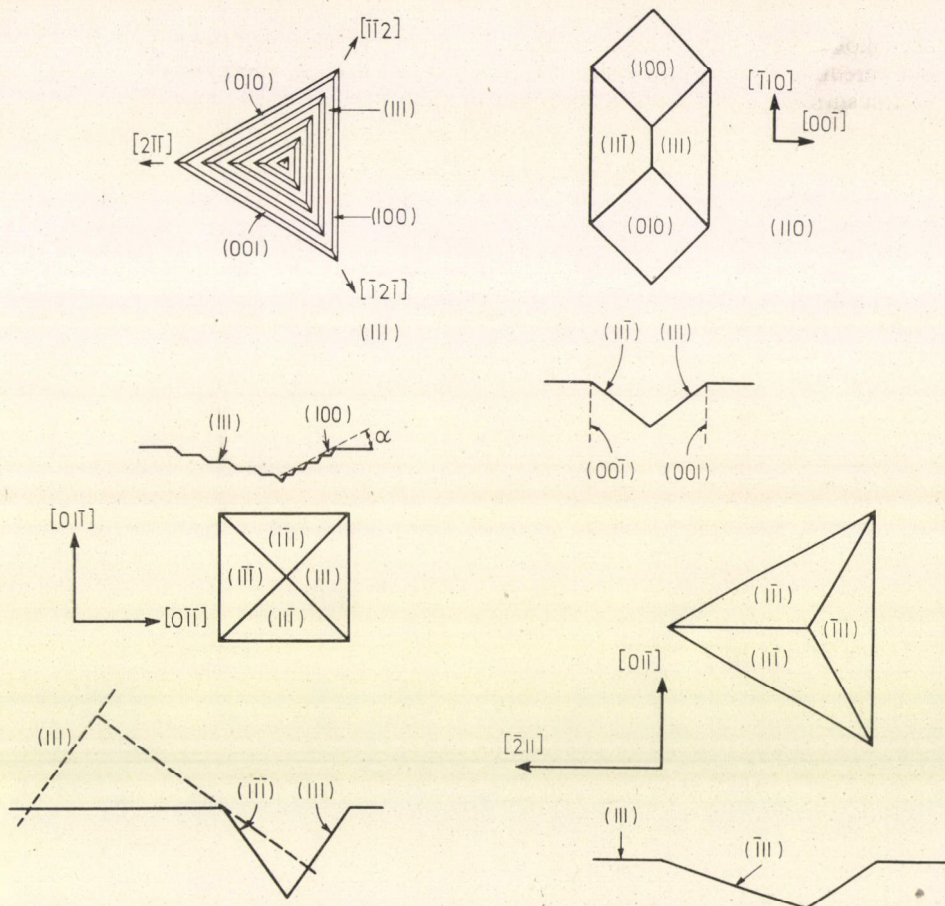
és háromszög alakú maratási gödrök keletkeznek, melyek egy szép példája a 32. ábrán látható.

Általánosságban megállapítható, hogy a maratási gödör falainak is teljesíteniük kell a Batterman—Irwing-féle feltételeket, és az üreg falait a leglas-



32. ábra. Köbös ZnS (III) lapján keletkező maratási gödrök. A gödrök falát borító síkok (III) típusúak, és zárt rendszert képeznek

sabban oldódó síkok fogják borítani a $\bar{v}_h \sec \Theta_{hs} > \bar{v}_s$ feltétel miatt. A maratási gödör éleinek, ill. a borítólapok metszésvonalának iránya esik egybe a maximális oldódási sebesség irányával. Ha egy adott orientációjú síkon keletkező maratási gödör esetén \bar{v}_h a minimális maratási sebesség (a reluktancia-görbe pozitív, ill. az oldódási sebesség polárdiagram negatív csúcsa), akkor egy, már kialakult maratási gödör a stabilitási feltételekből következően nem nőhet és nem tűnhet el. A stabil



33. ábra. Gyémántrácsú Ge felületein kialakuló maratási gödrök morfológiája. a) és d) (III) felületeken keletkező terraszos és sima falú maratási gödrök. b) (II0) felületeken kialakuló maratási gödrök. c) (100) felületeken keletkező maratási gödrök

borító síkok a reluktancia-görbe alapján is megkereshetők, ui. a reciprocitási feltétel értelmében a fő sík \bar{p}_s reluktanciavektorának végpontjára emelt merőleges és a vizsgált borító sík \bar{p}_h vektorának metszéspontja a reluktancia-görbén kívül kell, hogy elhelyezkedjen.

Ha a fenti feltételek nem teljesülnek, a maratási gödört alkotó síkok nem lehetnek azonos típusúak. Hexagonális rácsoknál, ahol a minimális oldódási sebességek

a prizmalapokon jelennek meg, a $\{0001\}$ síkokon keletkező maratási gödrök általában teraszos szerkezetűek. Ez nem csak ilyen esetekben fordulhat elő, Ge-nál például szintén keletkezhetnek teraszos maratási gödrök, melyek borítósíkjai $\{111\}$ típusúak [71]. Ez azt jelenti, hogy a teraszos szerkezet megjelenése nem feltétlenül több, különböző típusú szinguláris sík egyidejű fellépésének a jele, és sokszor másodlagos tényezők hatására jön létre.

Mint azt a 2.3. fejezetben láttuk, a Batterman—Irwing-feltételek különböző típusú síkokon, különböző krisztallográfiai zónákra más és más típusú stabil borító-síkokat eredményezhetnek. Ez azzal a következménnyel jár, hogy egy anyag különböző típusú síkjain a maratási gödrök szimmetriái eltérnek, és jellemzőek magára a síkra. Egyszerű viszonyokat tekintve pl. a gyémántrácsú Ge esetén a 33. ábrán látható morfológiák lépnek fel. Mivel az oldódási sebességek viszonya Ge esetén a marószerek többségére

$$\{100\} \gg \{110\} \approx \{111\},$$

a maratási gödör borítósíkjaként leggyakrabban az $\{111\}$ síkokkal találkozhatunk. Egyes, különleges esetekben $\{100\}$ síkok [42, 72] is találhatóak, ez azonban csak termikus maratásnál, ill. szuperoxol-maratásnál lép fel. Mint az ábrából látható, a $\{111\}$ felületeken kialakuló háromszöges alakzat élei $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, a lapok metszészonalának vetületei pedig $\langle \bar{2}11 \rangle$ irányoknak felelnek meg.

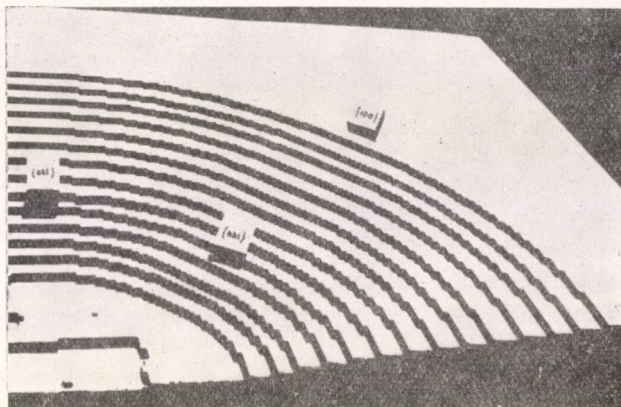
Jellegzetes, alacsonyabb szimmetria jellemző a $\{110\}$ felületen keletkező maratási gödrökre. Ezen felát szintén $\{111\}$ síkok borítják, melyek tengelye $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ irányoknak felel meg. A $\{100\}$ Ge felületeken keletkező maratási gödrök alakja négyzetes gúla, melynek lapjai $\{111\}$ síkok. A bázis éleinek az iránya $[01\bar{1}]$, ill. $[0\bar{1}1]$ irányokkal esik egybe. Jól látható, hogy a fenti szimmetriák egyértelműen meghatározzák azt a síkot, melyen a maratási gödör keletkezett, ezért gyakran maratás segítségével is orientálhatunk kristályokat.

A szimmetriaviszonyok tovább befolyásolhatók szennyezőkkel. Ezek a szennyezők lehetnek szándékosak és véletlenek is. Frank szerint [46] a maratás csak akkor eredményez jól észlelhető maratási gödröket, ha idegen anyag van jelen. A szennyezők elsősorban a felületi lépcsők haladási sebességére hatnak, ennek egyik lehetséges mechanizmusát a 3.2. fejezetben tárgyaltuk. Különösen fontos a felület síkjába eső oldódás sebességének csökkentése, mivel (3.2.8) egyenlet teljesülése gyakran csak külső beavatkozással, idegen anyagok hozzáadásával érhető el. Bonyolítja a viszonyokat az is, hogy az adszorbeálódó anyag sokszor a diszlokáció Cottrell felhőjéből oldódik ki. Befolyásolja a lépcsők mozgását az alaprács feloldódott komponenseinek abszorpciója is („back stress” effektus), ez utóbbiról azonban igen kevés ismerettel rendelkezünk.

A szennyezők befolyása leginkább ionos rácsok esetén érvényesül. Alkálihaloidok és LiF kristályok maratásakor idegen kationok már rendkívül kis koncentrációknál is jelentősen megváltoztatják a maratási gödrök morfológiáját [63—68, 73] lényegesen kisebb, de jól észlelhető hatást gyakorolnak a szennyező kation anionjai is [74—75]. Mivel a leoldódás, mint a 2.2. fejezetben láttuk, a felületi lépcsők kiugrásainak koncentrációjától függ, nyilvánvaló, hogy a fenti hatás vagy az aktív kiugrások számának megváltoztatása, vagy a telítetlenség (η) megváltoztatása útján hat. Az első esetben az adszorbeáló szennyező megállítja vagy lecsökkenti a kiugrás, ill. merőleges irányba a lépcső mozgását. A második eset akkor lehetséges, ha a szennyező és az oldódó anyag nem vagy igen rosszul disszociáló komplexet

képez, s így a telítetlenséget állandó, magas értéken tartja. Az utóbbi döntő jelentőségű a kiugrások keletkezése és egyensúlyi koncentrációja szempontjából, úgyhogy a két hatás szoros összefüggést mutat egymással.

Ha az adszorbeálódó szennyező csak kevésbé befolyásolja a lépcsők mozgását, akkor a kiugrások gyors eliminációja miatt $\{0kl\}$ típusú, ún. lépcsős felületek



34. ábra. $(0kl)$ és (hkl) típusú felületek modellje. Jól látható, hogy míg az $(0kl)$ felületek lépcsőket, a (hkl) felületek elsősorban kiugrásokat tartalmaznak

stabilak. Ilyenkor az a közepes idő, mely alatt egy kiugrás végigszalad egy adott hosszúságú lépcsőn kisebb, mint a két, egymást követő nukleációhoz szükséges idő ugyanazon lépcsőhosszon. Nagyobb inhibíció esetén, ha a kiugrások keletkezésének gyakorisága nagyobb, mint a kiugrás haladási sebessége a lépcső mentén, ún. $\{hkl\}$ felületek keletkeznek, melyeken a kiugrások sűrűsége maximális. Néha, meghatározott szennyező-koncentráció tartományban a maratási gödör falán mindkét típus megtalálható. Ilyenkor a 34. ábrán feltüntetett, egyszerű modell felel meg a maratási gödör falainak. Nagy gátló hatásnál és nukleáció gyakoriságnál, ill. az említett tényezők kis értékeinél egymáshoz hasonló, de egymáshoz képest elfordult alakú maratási gödrök keletkeznek. Ez a fentiekből nyilvánvaló. A fenti két paraméter szélsőértékeinek környezetében az elfordulás a síkban levő krisztallográfiai tengelyek szögfelezőjének és az egyik tengely által bezárt szögnek a nagyságrendjébe esik. (Köbös (100) lapon pl. 45° .) Alacsony inhibíciónál és nagy kiugrás-keletkezési gyakoriságnál a maratási gödör kúposá válik, mivel a gyors kiugrás-nukleáció megszünteti az orientációfüggést.

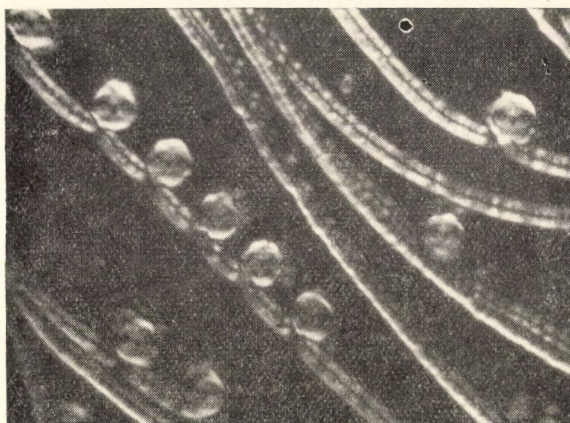
Kúpos maratási gödröknél a nagy kiugrás-sűrűség következményeként az elemi lépcsők görbülete a telítetlenség értékét is megváltoztatja. Ha a lépcső makroszkópos görbületi sugara r és centruma a diszlokáción van, az oldódó anyag koncentrációja a lépcső környezetében $C(r)$ lesz. Stacioner állapotban a koncentráció minden irányba csökken C_∞ értékig, mely az oldódó anyag koncentrációja a diszlokációtól, ill. a felülettől távol. A diszlokáción levő $C(0)$ koncentrációnak ki kell elégítenie a

$$C(r) > C(0) > C_\infty \quad 3.3.19$$

feltételt. A fenti mennyiségek közötti összefüggés

$$\frac{C(0) - C_\infty}{C(r) - C_\infty} = \frac{\pi}{\ln \frac{r}{h}} < 1 \quad 3.3.20$$

ha $r > 40h$, ahol h az elemi lépcsőmagasság. A $C(r)$ érték r -rel egészen a telítési C_0 értékig nőhet. Ha feltételezzük, hogy egy új lépcső nukleálódásánál $C(0)/C_0$ azonos a (3.1.12)-ben szereplő C_k/C_0 -al, r/h makroszkóposan nagy C minden érté-



35. ábra. ZnS kristály (III) lapján előhívott, dekorált spirálnövekedés. Jól látható az egyes precipitációk közötti, füzerszerű lépcsőmozgás

kére. (LiF-ra, pl. még $C=0$ -nál is az $r/h \sim 10^6$), ami azt jelenti, hogy $g \ll g^+$, azaz a felület „polírsima”, és látható maratási gödör nem keletkezhet. A fenti ellentmondást Prince [75] kristálynövekedésre kidolgozott munkahipotézisének alkalmazásával lehet feloldani, ui. ha kismennyiségű adszorbeálódó szennyezős atomosan v. apró idegen fázis formájában kidekorálja az elemi lépcsőket, ezek a szennyezők között füzerszerűen fognak oldódni. Ez azzal a következménnyel jár, hogy nem a makroszkópos r sugár, hanem a szennyezők távolságának nagyságrendjébe eső d sugár értéke szabja meg $C(r)$ értékét.

A $C(r)$ értéke kicsi marad, nagyságát a szennyező adszorpció szabja meg, és a „back-stress” effektus eltűnik. A fenti jelenség egy makroszkópos példája látható a 35. ábrán.

Ha a maratási gödör fala a szennyező-hatásra nem válik görbültté, az adszorpció mértékének függvényében különböző morfológiák léphetnek fel $\{0kl\}$, $\{hkl\}$ vagy más síkok kialakulása közben. Különösen jól tanulmányozható ez NaCl-on, melynek viselkedéséről számos adat áll rendelkezésünkre [74]. Ecetsavas maratásnál (100) lapon négyzetes gúla alakú maratási gödrök keletkeznek. Az alap éleinek orientációja szintén $[100]$. $CdCl_2$ -t adva a marószerhez, a maratási gödör borítólapjai között $\{11\bar{1}\}$ lapok jelennek meg, ezért a maratási gödör ditetragonális piramis alakúvá alakul, melynek borítólapjai $\{11\bar{1}\}$ és $\{0kl\}$ típusúak. A $CdCl_2$ koncentrációjának további növekedése ismét négyzetes gúla alakú maratási gödröket eredményez, ez azonban 90° -kal elfordult a kiindulási négyzetes gúlához viszonyítva. Ha az ecetsavhoz nem $CdCl_2$ -t, hanem NaCl-t adunk, hasonló morfológiák érhetők el, de a NaCl nagy koncentrációjánál kónikus maratási gödrök keletkeznek. Nyolcszögű formák is kialakulhatnak, ha az érintőleges oldássebesség kielégíti a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \bar{v}_t[1\bar{1}0] < \bar{v}_t[100] < \sqrt{2} \bar{v}_t[100]$$

feltételt. Ha $\bar{v}_i[110] = \bar{v}_i[100]$, akkor a nyolcszög szimmetrikussá válik. Ez, különösen etilalkoholt alkalmazva maratószerként Cd-haloid inhibitorok alkalmazásával érhető el. Bonyolítja a viszonyokat az, hogy a morfológiát az inhibitor minősége és mennyisége mellett a maratás hőmérséklete is erősen befolyásolja. Ez, mivel a szennyezők hatását adszorpciós mechanizmussal értelmezzük, természetesnek tűnik. NaCl esetén az etilalkohol Cd-haloid maratószer alkalmazásakor pl. az (100) síkon szobahőfokon négyzetes, 50° C-on nyolcszögű gúla alakú maratási gödrök keletkeznek [68].

A morfológia megváltoztatásán túl a szennyezők sokszor tökéletesen is megátolhatják egyes diszlokációk kialakulását. Néhány esetben ez lehetővé teszi, hogy a diszlokációk között különbséget tegyünk. NaF esetén pl. sikerült a csavar-diszlokációk maratási sebességét minimálisra szorítani Mn^{2+} ionok jelenlétében [73]. LiF-nál szintén eltérés idézhető elő a csavar és éldiszlokációk mélysége között [63].

IRODALOM

1. J. J. Bikerman, *Phys. Stat. Sol.* 10, 3, 1965.
2. J. W. Gibbs: „Scientific Papers” Longmans Green. London. 1956.
3. G. Z. Wulff, *Z. Krist.* 34, 449, 1901.
4. N. Shockley, W. T. Read, *Phys. Rev.* 75, 692, 1949, 78, 275, 1950.
5. P. Lacombe: „Rept. on Conf. on Strenght of Solids” *Phys. Soc. London*, 1947.
6. P. Lacombe, L. Beaujard, *J. Inst. Merals*, 74, 1, 1948.
7. F. H. Horn, *Phil. Mag.* 43, 1210, 1952.
8. R. Gevers, *Nature*, 171, 1953.
9. R. Gevers, *J. Chim. Phys.* 50, 321, 1953.
10. R. Gevers, S. Amelinckx, W. Dekeyser, *Naturwiss.* 39, 448, 1952.
11. F. L. Vogel, N. G. Pfann, H. E. Corey, E. E. Thomas, *Phys. Rev.* 90, 489, 1953.
12. W. K. Burton, N. Cabrera, F. C. Frank, *Trans. Roy. Soc. A243*, 299, 1951.
13. F. C. Frank, „Adrances in Physics” Vol. 1. p. 91, 1952.
14. J. M. Hodges, J. W. Mitchell, *Phil. Mag.* 44, 223, 357, 1963.
15. D. A. Jones, J. W. Mitchell, *Phil. Mag.* 2, 1047, 1957.
16. W. C. Dash, *J. Appl. Phys.* 27, 1193, 1956.
17. J. B. Newkirk, *Phys. Rev.* 110, 1465, 1958.
18. J. B. Newkirk, *Trans. Aime*. 215, 483, 1959.
19. W. G. Johnston: „Progress in Ceramic Sciences” Vol. 2. J. E. Burke, Pergamon Press, Oxford. 1962.
20. A. R. Lang, *J. Aplp. Phys.* 30, 1748, 1959.
21. Szántó I., *Műszaki Tudomány* 41, 241, 1969.
22. C. Herring: *Structure and Properties of Solid Surfaces*” Ed. R. Gomer, C. S. Smith. Univ. Chicago Press. Chicago. 1953.
23. R. Shuttleworth, *Proc. Roy. Soc. London.* A63, 444, 1950.
24. W. Kossel: „Die molekularen Vorgänge beim Kristallwachstum” S. Hizzel, Leipzig. 1928.
25. I. N. Stranski, *Z. Krist.* 105, 481, 1943.
26. J. Frenkel, *J. Phys. USSR* 9, 392, 1945.
27. W. J. Dunning: „Physics and Chemistry of the Organic Solid State” Vol. 1. Ed. D. Fox, M. M. Labes, A. Weissberger Interscience Publishers, New York. 1963.
28. C. Herring, *Phys. Rev.* 82, 87, 1951.
29. L. Onsager, B. Kaufmann, „Rept. lab. Conf. on Fundamental Particles and Low Temperatures” Cambridge, *Phys. Soc. London*. 1947.
30. G. H. Wannier, *Ker. Mod. Phys.* 17, 50, 1945.
31. N. K. Burton, N. Cabrera: *Disc. Farad. Soc. Crystal Growth*. 1949.
32. A. R. Verma: „Crystal Growth and Dislocations” *Acad. Pres.* New York. 1953.
33. L. Jasper, W. Schaarwächter, *Z. Metallk.* 57, 661, 1966.
34. W. Schaarwächter, K. Lücke, *Z. Phys. Chemie* 53, 1, 1967.
35. W. A. Johnson, R. F. Mehl, *Trans. Aime*. 135, 416, 1949.

36. K. Lücke, Z. Metallk. 41, 114, 1950.
37. I. N. Stranski, Z. Phys. Chem. A 136, 259, 1928, B 11, 343, 1931.
- B 17, 127, 1932.
38. I. N. Stranski; R. Kaischew, Z. Krist. 78, 373, 1931.
39. I. N. Stranski: Disc. Farad. Soc. 5, 13, 1949.
40. I. N. Stranski, VDI Berichte 20, 5, 1957.
41. H. Brandes, Z. Phys. Chem. 126, 196, 1927.
42. B. W. Batterman, J. Appl. Phys. 28, 1236, 1951.
43. B. A. Irving, J. Appl. Phys. 31, 109, 1960.
44. R. J. Jaccodine, J. Appl. Phys. 33, 2643, 1962.
45. G. A. Wolff, J. J. Frawley, J. R. Hietanen, J. Electrochem Soc. 111, 22, 1964.
46. F. C. Frank: „Growth and Perfection of Crystals” Ed. K. H. Doermus. John Wilay and Sons. New York. 1958.
47. N. Cabrera: „Reactivity of Solids” Ed. J. H. de Boer Elsevier Publ. Inc. Amsterdam. 1961.
48. F. C. Frank, M. B. Ives: J. Appl. Phys. 31, 1998, 1960.
49. W. W. Mullins, J. P. Hirth, J. Phys. Chem. Sol. 24, 1391, 1963.
50. N. Cabrera, M. M. Levine, J. S. Plaskett, Phys. Rev. 96, 1153, 1954.
51. N. Cabrera, M. M. Levine, Phil. Mag. 1, 450, 1956.
52. N. Cabrera: „Semiconductor Surface Physics” Ed. R. H. Kingston, Univ. Pennsylvania Press. Paun. 1957.
53. N. Cabrera: „The Surface Chemistry of Metals and Semiconductors.” Ed. H. C. Gatos. John Wiley and Son. New York, 1960.
54. F. C. Frank, Acta. Cryst. 4, 497, 1951.
55. F. R. N. Nabarro: „Theory of Crystal Dislocations” Oxford Univ. Press, Oxford. 1967.
56. D. Nenow, Phys. Stat. Sol. 3, 654, 1963.
57. W. Schaarwächter, K. Lücke, Z. Phys. Chem. 53, 1, 1967.
58. W. Schaarwächter, Phys. Stat. Sol. 12, 375, 865, 1965.
59. A. Englert, H. Tompa, J. Phys. Chem. Sol. 21, 306, 1961.
60. A. Englert, H. Tompa, J. Phys. Chem. Sol. 24, 1145, 1963.
61. H. B. Huntington, J. E. Dickey, R. Thomson, Phys. Rev. 100, 1117, 1955.
62. M. Doyama, R. J. M. Cotterill, Phys. Letters, 13, 110, 1964.
63. J. J. Gilman, W. G. Johnston, G. W. Sears, J. Appl. Phys. 29, 747, 1958.
64. M. B. Ives, J. P. Hirth, J. Chem. Phys. 33, 517, 1960.
65. J. J. Gilman, W. G. Johnston: „Dislocations and Mechanical Properties of Crystals” John Wiley, New York, 1957.
66. P. R. Moran: J. Appl. Phys. 29, 1768, 1958.
67. G. A. Slack: Phys. Rev. 105, 832, 1957.
68. M. B. Ives, J. Phys. Chem. Solids 24, 275, 1963.
69. M. Mclean, J. P. Hirth, Surf. Sci. 5, 103, 1968.
70. L. Brand, „Vector and Tensor Analysis” John Wiley, New York. 1947.
71. Arizumi, I. Akosaki, Japan. J. Appl. Phys. 1, 350, 1962.
72. J. W. Faust, „The Surface Chemistry of Metals and Semiconductors” Ed. H. C. Gatos. John Wiley, New York. 1960.
73. J. W. Davisson, S. Levinson, J. Appl. Phys. 37, 4888, 1966.
74. B. H. Розанский, Е. В. Парвова, В. М. Степанова, А. А. Предводителев Крист. 6, 704, 1961.
75. P. B. Price, D. A. Vermilyea, M. B. Webb, Acta. Met. 6, 524, 1958.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

FOLYTONOSSÁGI TÉTELEK FÉLIG EGYSZERŰ LIE-CSOPORTOKRA*

B. L. VAN DER WAERDEN

Egy folytonos csoport topologikus kontinuum, mely egyszersmind csoport; azt tehát egy pontthalmaz, egy környezet-rendszer és egy összetevési szabály megadása meghatározza.¹

A kísérlet, hogy a topológiai relációkat egészen általánosan tisztán csoportelméleti relációkra, ill. a környezet-rendszert az összetevési szabályra vezessük vissza, nem járhat sikerrel, hiszen — mint ismeretes — már az egyparaméteres folytonos csoportoknak is vannak diszkontinuus automorfizmusaik, azaz olyan leképezéseik önmagukra, amelyek a csoportműveletet megőrzik, a topologikus relációkat azonban nem. Azt, hogy Abel-féle invariáns alcsoporttal (normálosztóval) nem rendelkező csoportok (az ún. félig egyszerű csoportok) esetében is lehetségesek diszkontinuus automorfizmusok, mutatja a következő példa, melyet J. von Neumann közölt velem.

Az egységnyi determinánsú $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ komplex mátrixok hatparaméteres csoportja (egy 2-rendű diszkrét normálosztó erejéig) egyszerű és a következő diszkontinuus automorfizmusokkal rendelkezik:

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} f(\alpha) & f(\beta) \\ f(\gamma) & f(\delta) \end{pmatrix},$$

ahol f a komplex számtest egy diszkontinuus automorfizmusa. Az ilyen automorfizmusok még az egyparaméteres alcsoportokat sem őrzik meg. Azaz: a Lie-elmélet tisztán csoportelméleti értelmezése az ilyen és más hasonló csoportok esetében lehetetlen.

Annál meglepőbb, hogy a Lie-csoportok egy kiterjedt osztálya: a *kompakt félig egyszerű* csoportok esetében megadható egy a topologikus teret definiáló környezet-rendszer egyedül a csoportművelet alapján, amint azt ebben a dolgozatban be fogjuk bizonyítani. Ez a $G(A)$ szorzatok egy $\mathfrak{M}(A)$ halmazának képzése útján sikerül, mely a csoport félig egyszerű volta alapján az egységelem egy teljes környezetét lefedi s a kompaktság alapján alkalmas A mellett az egység tetszőlegesen kicsiny környezetében bennfoglaltatik. Ebből következik, hogy e csoportok esetében diszkontinuus automorfizmusok nem lehetségesek; ugyancsak nem lehetségesek diszkontinuus izomorfizmusok az ilyen csoportok között.

Ugyanezzel a módszerrel az is kiadódik, hogy a félig egyszerű Lie-csoportoknak az egység valamely környezetében korlátos ábrázolásai (speciálisan az unitér

* Math. Z. 36 (1932) 780.

¹ O. Schreier, Abstrakte kontinuierliche Gruppen, Abh. math. Sem. Hamburg 4 (1926) 15—32. old.

ábrázolások valamennyien) folytonosak (s ezzel együtt tudvalevőleg infinitezimális transzformációk segítségével generálhatók², tehát analitikusak). Ez a tétel a félig egyszerű csoportokra vonatkozóan élesítését képezi J. von Neumann egy eredményének, ki azt találta, hogy egy lineáris csoportnak lineáris transzformációkkal való ábrázolása esetében az ingadozás az egység környezetében vagy 0, vagy ≥ 1 .³ Az itt bebizonyított tétel értelmében az ingadozás félig egyszerű csoportokra vagy 0, vagy ∞ . Azt, hogy valóban lehet ∞ , ismét a fenti, v. Neumanntól származó példa mutatja.

Végül bebizonyítjuk, hogy az „egyszerű Lie-csoportoknak”, melyeknek önmagukon kívül nincs Lie-féle normálosztójuk, egyáltalán nem lehet normálosztójuk, nem tekintve önmagukat s a diszkrét centrumot. Egy ennek megfelelő tétel érvényes a félig egyszerű Lie-csoportokra, ezzel azonban nem érdemes részletesebben foglalkoznunk.

Először emlékeztetek az n -paraméteres folytonos csoportok Lie-féle elméletének néhány alapfogalmára.

Bármely n -paraméteres Lie-csoport az egységelem valamely környezete (Schreier szerint a „csoportcsíra”) segítségével generálható, amelyet „kanonikus paraméterek” bevezetése útján le lehet képezni egy teljes n -dimenziós euklideszi gömbre oly módon, hogy a gömb középpontján áthaladó sugarak az egyparaméteres alcsoportoknak felelnek meg (a csoportcsírában). Ekkor a vektorok a középpontban a csoport infinitezimális transzformációinak felelnek meg. A következőkben nem teszünk különbséget a csoportelemek és a teljes gömb nekik megfelelő pontjai, s ugyanúgy az infinitezimális transzformációk és a nekik megfelelő vektorok között.

Az $A \rightarrow BAB^{-1}$ transzformáció az egyparaméteres alcsoportokat egyparaméteres alcsoportokba transzformálja; a J infinitezimális transzformációkat ennél fogva BJB^{-1} infinitezimális transzformációkba viszi át. Az infinitezimális transzformációk itt lineárisan transzformálódnak: A vektortest ezen lineáris transzformációi képezik az „adjungált csoportot”. Az eredeti csoport valamely K infinitezimális transzformációjának az adjungált csoportban is megfelel egy infinitezimális transzformáció, mely a J vektort $[KJ]$ -be viszi át (ez bilineárisan függ J -től és K -tól).

² Lásd J. von Neumann, Math. Zeitschr. 30 (1929) 3—42. old. Ehelyütt szeretnénk rámutatni: az említett dolgozat V. fejezetében foglalt bizonyítás, hogy valamely Lie-csoport folytonos ábrázolása egyszersmind differenciálható s azt infinitezimális transzformációk generálják, egyszerűbben keresztülvihető a következőképpen. Szorítkozzunk először \mathbb{G} -ben egy e^{At} egyparaméteres alcsoportcsírára az egységelem egy olyan környezetében, ahol az ábrázoló mátrixok egyértelműen az $e^B = C$ alakba írhatók és $B = \log C$ csak kevéssel különbözik a null-mátrixtól. Ha az e^A csoportelemet e^B ábrázolja, úgy az $e^{\frac{1}{2}A}$ négyzetgyök csakis $e^{\frac{1}{2}B}$ -vel ábrázolható. Ugyanúgy az $e^{\frac{1}{2^m}A}$ csoportelemet az $e^{\frac{1}{2^m}B}$ mátrix és így az $e^{\frac{a}{2^m}A}$ csoportelemet $e^{\frac{a}{2^m}B}$ ábrázolja. Az ábrázolás folytonosságából következik, hogy e^{At} -t e^{Bt} ábrázolja. — Ha a \mathbb{G} csoport n -paraméteres, úgy azt n számú egyparaméteres $e^{A_i t}$ alcsoport segítségével oly módon generálhatjuk, hogy az egységelem valamely környezetében minden csoportelem egyértelműen az

$$e^{A_1 t_1} e^{A_2 t_2} \dots e^{A_n t_n}$$

szorzat alakjában jelenik meg. Az

$$e^{B_1 t_1} e^{B_2 t_2} \dots e^{B_n t_n}$$

ábrázoló mátrix ekkor a t_1, \dots, t_n paraméterektől analitikusan függ.

³ J. von Neumann, S.—B. preuss. Akad. Wiss. 1927, 76—90. old. Az 1 korlát pontosan 2-vé élesíthető.

Az n -paraméteres \mathfrak{G} csoport valamely m -paraméteres \mathfrak{H} alcsoportjának az infinitezimális transzformációkra való áttéréskor az n -dimenziós vektortérnek egy (a középpontot tartalmazó) m -dimenziós altere felel meg, mely J -vel és K -val együtt $[KJ]$ -t is tartalmazza, s megfordítva minden ilyen alter kicsinyben, vagyis az egységelem mondott környezetében egy ilyen \mathfrak{H} alcsoportot definiál. Ha \mathfrak{H} normálosztója \mathfrak{G} -nek, úgy a neki megfelelő alter J -vel együtt $[KJ]$ -t is tartalmazza, ahol K tetszőleges infinitezimális transzformációja \mathfrak{G} -nek; vagy ami ugyanaz: az alteret az adjungált csoport önmagába transzformálja.

A \mathfrak{G} csoportot egyszerűnek mondjuk (a Lie-féle értelemben), ha nem tartalmaz Lie-féle normálosztót önmagán (s ha úgy tetszik, az egyedül az egységelemet tartalmazó csoporton) kívül,⁴ vagy ami ugyanaz, ha a neki megfelelő vektortest nem tartalmaz az adjungált csoporttal szemben invariáns valódi alteret. A \mathfrak{G} csoportot megoldhatónak mondjuk, ha létezik az Abel-féle faktorcsoporthoz rendelkező Lie-féle normálosztóknak egy olyan lánc, amely \mathfrak{G} -vel kezdődik és az egyedül az egységelemből álló csoporttal (egységcsoporthal) végződik. A \mathfrak{G} csoport félig egyszerű, ha nincs megoldható Lie-féle normálosztója (az egységcsoporthon kívül).

Az egyparaméteres egyszerű Lie-féle csoportok Abel-csoportok; minden más egyszerű Lie-csoport nem Abel-féle s legfeljebb diszkrét centruma lehet. — Valamely félig egyszerű Lie-csoport kicsinyben (egynél több paraméteres) egyszerű Lie-csoportok direkt szorzata.⁵

Legyen \mathfrak{G} egy n -paraméteres folytonos csoport, melynek centruma diszkrét; A legyen tetszőleges elem kívül a centrumon, $\mathfrak{M}(A)$ pedig a

$$G(A) = \prod_1^n C_v(B_v A B_v^{-1} A^{-1}) C_v^{-1}$$

szorzatok összessége, ahol B_v és C_v az egész csoportot befutják. Ekkor a következőket állítjuk:

1. Az \mathfrak{M} halmaz A alkalmas választása mellett benne foglaltatik az egységelem tetszőlegesen kicsiny környezetében, ha \mathfrak{G} kompakt.

2. Az \mathfrak{M} halmaz mindenkor tartalmazza az egységelem egy teljes környezetét, ha \mathfrak{G} egynél több paraméteres „egyszerű Lie-csoport”.

1. bizonyítása. Legyen $U(1)$ az egység valamely környezete és A_1, A_2, \dots a csoportelemek 1-hez tartó sorozata. Azt állítjuk, hogy a sorozat tartalmaz olyan A_μ -t, hogy $\mathfrak{M}(A_\mu)$ bennefoglaltatik $U(1)$ -ben. Ha nem így volna, akkor minden A_μ -höz tartoznék olyan

$$G_\mu = \prod_1^n C_{v_\mu}(B_{v_\mu} A_\mu B_{v_\mu}^{-1} A_\mu^{-1}) C_{v_\mu}^{-1},$$

mely kívül fekszik $U(1)$ -en. A C_{v_μ}, B_{v_μ} sorozatokból minden v -re szimultán kon-

⁴ Csoportelméleti értelemben a csoportnak nem kell egyszerűnek lennie, mivel tartalmazhat diszkrét normálosztókat. Egyéb zárt normálosztója nincs neki, mivel E. Cartan egy tétele szerint (Mém. Sci. math. 42 (1930) 25. old.) valamely Lie-csoport bármely zárt alcsoportja egy Lie-féle alcsoportból és ezen Lie-féle alcsoport mellékosztályainak egy diszkrét halmazából tevődik össze.

⁵ Lásd E. Cartan, Thèse de doctorat, Paris 1894, 53. old.

vergens részsorozatokat választhatunk ki: $C_{v\mu} \rightarrow C_v$ és $B_{v\mu} \rightarrow B_v$. Ekkor $\lim A_\mu = 1$ folytán következik:

$$\lim G_\mu = \prod_1^n C_v (B_v B_v^{-1}) C_v^{-1} = 1,$$

azaz mégis végtelen sok G_μ elemnek kell $U(1)$ -ben feküdnie, ellentétben a feltevessel.

2. *bizonyítása.* Minthogy A kívül fekszik a centrumon, van olyan B , melyre $BAB^{-1} \neq A$. Fusson be ez a B elem egy egyparaméteres alcsoportot: $B = B_t$, ahol a t „idő” egy valós paraméter és $B_0 = 1$; ekkor $B_t A B_t^{-1}$ egy A -ból kiinduló utat fut be, mely az A pontot zérustól különböző sebességgel hagyja el.⁶ Az $A_t = B_t A B_t^{-1} A^{-1}$ pont tehát az egységelemet ugyancsak zérustól különböző v sebességgel fogja elhagyni.

A v vektor, és a v -ből az adjungált csoport transzformációival nyert CvC^{-1} vektorok olyan rendszert képeznek, amelyben n lineárisan független vektornak kell előfordulnia. Az ellenkező esetben ugyanis az általuk kifeszített lineáris tér dimenziója kisebb volna, mint n ; ez a tér az adjungált csoporttal szemben invariáns volna, \mathfrak{G} -nek tehát egy normálosztóját határozná meg, ami ellentmond feltevésünknek, mely szerint \mathfrak{G} egyszerű. Van tehát n lineárisan független

$$C_1 v C_1^{-1}, C_2 v C_2^{-1}, \dots, C_n v C_n^{-1}$$

vektor; a

$$C_1 A_t C_1^{-1}, C_2 A_t C_2^{-1}, \dots, C_n A_t C_n^{-1}$$

csoportelemek $t=0$ -hoz tartozó sebességvektorai. Képezzük most a

$$G(t_1, \dots, t_n) = (C_1 A_{t_1} C_1^{-1})(C_2 A_{t_2} C_2^{-1}) \dots (C_n A_{t_n} C_n^{-1})$$

szorzatot, melynek p_1, \dots, p_n kanonikus paraméterei a t_1, \dots, t_n paramétereknek folytonosan differenciálható függvényei; ez a szorzat mindenestre hozzátartozik az $\mathfrak{M}(A)$ halmazhoz. A sebességvektorok lineáris függetlenségéből következik, hogy a

$$\frac{\partial(p_1, \dots, p_n)}{\partial(t_1, \dots, t_n)}$$

függvénydetermináns nullától különböző. A $G(t_1, \dots, t_n)$ csoportelemek tehát lefedik az egységelem egy teljes környezetét, amivel 2. bizonyítást nyert.

Még megjegyezzük, hogy a 2. állítás a bizonyítás szerint akkor is érvényes, ha a B_v és C_v elemeket $\mathfrak{M}(A)$ definíciójában az egységelem egy környezetére korlátozzuk.

Mindenekelőtt következik 2-ből: Ha \mathfrak{G} egy „egyszerű Lie-csoport”, úgy a 3 centrum szerint képezett $\mathfrak{G}/3$ faktorcsoporthoz egyszerű csoport a szó csoportelméleti értelmében. Ha ugyanis \mathfrak{G} valamely normálosztója a centrum elemein kívül tartalmaz még egy A elemet, úgy valamennyi $G(A)$ szorzatot tartalmazza, vagyis az egységelem valamely környezetét, s így az egész csoportot.

Következik továbbá 1-ből és 2-ből, hogy egy \mathfrak{G} kompakt egyszerű Lie-csoportban a tisztán csoportelméletileg definiált $\mathfrak{M}(A)$ halmazok használhatók, mint az egységelem „környezetei”; azok nem nyílt halmazok ugyan, mindazonáltal az egy-

* Ha a kezdeti sebesség zérus volna, úgy $B_t A B_t^{-1} = A = \text{const.}$ volna, amint az az adjungált csoport differenciál-egyenleteiből azonnal következik.

ségelemet topológiai értelemben „definiálják”. Ha H tetszőleges csoportelem, úgy a $H \cdot \mathfrak{M}(A)$ halmazok ugyanilyen értelemben a H elem környezetei. Ezen környezet-rendszer segítségével az összes topológiai alapfogalom (limesz, torlódási pont stb.) a szokott módon definiálható.

Ebből következik mármost, hogy *valamely kompakt egyszerű többparaméteres Lie-csoport minden automorfizmusa folytonos automorfizmus*. Ha még megjegyezzük, hogy az 1. és 2. tulajdonságok megmaradnak, ha az $\mathfrak{M}(A)$ halmazok definíciójában szereplő n számot egy nagyobb számmal helyettesítjük, akkor ugyanígy bebizonyíthatjuk, hogy minden izomorfizmus, mely egy kompakt egyszerű nem Abel-féle Lie-csoportot ugyanolyan Lie-csoportba visz át, folytonos izomorfizmus. *Eszerint két kompakt egyszerű Lie-csoport között csak akkor állhat fenn izomorfizmus, ha e két Lie-csoport egymással folytonosan izomorf.*

Fő eredményünk: a környezetek tisztán csoportelméletileg definiált rendszerének megadása, immár könnyen kiterjeszthető kompakt félig egyszerű csoportokra. Egy ilyen \mathfrak{G} csoport kicsinyben egyszerű Lie-csoportok direkt szorzata: $\mathfrak{H}_1 \times \mathfrak{H}_2 \times \dots \times \mathfrak{H}_r$. Nagyban a szorzatnak nem kell direktnek lennie, hanem minden egyes faktorhoz tartozhat egy a többi faktor szorzatával közös diszkrét véges csoport. Ha azonban képezzük \mathfrak{G} faktorcsoportját a 3 centrum szerint, úgy ez pontosan az egyszerű $\mathfrak{H}_i/3_i$ faktorcsoportok direkt szorzata lesz. Ezek csoportelméleti értelemben is egyszerűek, egy ismert csoportelméleti tétel szerint tehát centrálizomorfia erejéig egyértelműen meg vannak határozva. Minthogy $\mathfrak{G}/3$ centruma csak az egyszerűséget foglalja magában, még az is igaz, hogy a faktorok teljes egyértelműséggel meg vannak határozva. Ha a 3 szerinti faktorképzést visszacsináljuk, úgy következik, hogy $\mathfrak{H}_1, \dots, \mathfrak{H}_r$ ugyancsak egyértelműen meg van határozva \mathfrak{G} által. Eszerint a környezetek \mathfrak{G} -ben is tisztán csoportelméletileg meg vannak határozva.

Ha adott valamely félig egyszerű Lie-csoportban az egység valamely környezetének ábrázolása, melynek mátrixelemei korlátosak, úgy ez az ábrázolás szükségképpen folytonos.

Elegendő a bizonyítást egyszerű Lie-csoport esetre elvégezni. Feltehetjük, hogy az ábrázolás a csoport egységelemének környezetében hú (azaz egy-egyértelmű); az ugyanis az ellenkező esetben az azonos ábrázolás volna.

Az ábrázoló mátrixok halmazában az egységmátrix nem lehet izolált, mivel ekkor az ábrázolás minden mátrixának izoláltnak kellene lennie s a halmaz csupán megszámlálható volna. Van tehát olyan A mátrix, amely A -t ábrázolja és az egységmátrixtól tetszőlegesen kevéssel különbözik. Képezzük, mint fent, a $G(A)$ csoportelemeket, ahol a B_v, C_v elemeket korlátozzuk az egységelem oly kicsiny környezetére, hogy valamennyi, a $G(A)$ -ban előforduló szorzat és inverz még benne foglaltassék az egységelem szemügyre vett környezetében; ekkor az ilyen $G(A)$ csoportelemhez rendelt

$$G(A) = \prod_1^n C_v (B_v A B_v^{-1} A^{-1}) C_v^{-1}$$

mátrix B_v és C_v , és inverzeik korlátossága folytán tetszőlegesen kevéssel különbözik az egységmátrixtól. A $G(A)$ elemek közé tartozik azonban a fenti 2. tétel szerint az egységelem valamely környezetének minden eleme. Ebből következik az ábrázolás folytonossága ezen a helyen s ezzel együtt a folytonosság egyáltalán.

A Li^+ HIPERFINOMSZERKEZETÉRŐL*

P. GÜTTINGER és W. PAULI

Matematikai függelék

I. A multiplett-komponensek relatív intenzitásai

A multiplett-intenzitásokra vonatkozó ismert képletek levezetése a kvantummechanikából egyedül Dirac¹ munkájában található meg. Az ő módszere abban áll, hogy bevezeti a hatás- és szögváltozókat mint q -számokat, ami azonban számunkra felesleges bonyodalomnak látszik. Kramers úr oly szíves volt, hogy levél útján közölt velünk egy másik, eddig nyilvánosságra nem hozott hullámmechanikai módszert e képletek levezetésére.² Minthogy azonban ez feltételezi a spinvektorok transzformációs tulajdonságainak pontos ismeretét a térbeli elforgatásokkor, úgy véltük, nem felesleges a szóban forgó képleteket elemi mátrix-módszerrel levezetni s a levezetést közzétenni, annál is inkább, mivel korábbi számításainkhoz a mátrixelemek abszolút értékének ismerete nem elegendő, hanem a relatív előjeleket is ismernünk kell.

Ami a Zeeman-komponensek intenzitásait (a mátrixelemek m -függését) illeti, ilyen levezetés már ismeretes³; Born és Jordan ezen eredményeit felhasználtuk.

I. A probléma megfogalmazása. Az m kvantumszám leválasztása. Két impulzusmomentum-vektorunk van: az \mathbf{s} spin és az \mathbf{l} pályamomentum, melyeket a $\hbar/2\pi$ egységben mérünk. Ezek ketten a \mathbf{j} vektorra tevődnek össze:

$$\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l}. \quad (1)$$

Fennállnak a következő felcserélési relációk (F.R.):

$$\left. \begin{aligned} [\mathbf{j}_x, \mathbf{A}_x] &= 0, \\ [\mathbf{j}_x, \mathbf{A}_y] &= [\mathbf{A}_x, \mathbf{j}_y] = i\mathbf{A}_z, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

$$\text{és} \quad [\mathbf{j}_y, \mathbf{B}] = 0, \quad (3)$$

ahol $\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y, \mathbf{A}_z$ tetszőleges vektor komponensei és \mathbf{B} tetszőleges skalár; ezek az atomi elektronok spinmomentumainak, hely- és impulzus-koordinátáinak bármilyen függvényei lehetnek.⁴ Speciálisan \mathbf{A} helyére behelyettesíthető valamely elektron \mathbf{r} koordinátavektora vagy a \mathbf{p} impulzusvektor, vagy a teljes elektromos

* Z. Physik **67**, 754, 1931.

¹ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London (A) **111**, 281, 1926.

² Időközben megjelent: Proc. Amst. Akad. **23**, 953, 1930.

³ Vö. M. Born. és P. Jordan, Elementare Quantenmechanik, Berlin 1930, 4. fejj., 25—29. §§.

⁴ Csak c -számvektorokat, így külső télerősségeket stb. nem tartalmazhatnak explicit módon e függvények.

momentum vektora, vagy maga \mathbf{s} , \mathbf{I} vagy \mathbf{j} is. A legutóbbi választás mellett speciálisan kapjuk:

$$[\mathbf{j}_x, \mathbf{j}_y] = i\mathbf{j}_z. \quad (1')$$

Itt speciálisan az az eset érdekel bennünket, amikor \mathbf{j}_z és \mathbf{j}^2 átlós mátrixok. Ismeretes, hogy \mathbf{j}^2 mátrixának $j(j+1)$ sajátértékéhez a \mathbf{j}_z mátrix $-j \leq m \leq +j$ sajátértékei tartoznak. A (3) összefüggésből $\mathbf{B} = \mathbf{j}^2$ mellett következik továbbá:

$$[\mathbf{j}^2, \mathbf{j}_x] = 0, \dots, \quad (3')$$

úgyhogy $\mathbf{j}_x, \mathbf{j}_y, \mathbf{j}_z$ átlósak j -ben. Az \mathfrak{A} tetszőleges vektorra vonatkozóan Dirac⁵ szerint (1)-ből következik:

$$[\mathbf{j}^2, [\mathbf{j}^2, \mathfrak{A}]] = \mathbf{j}^4 \mathfrak{A} - 2\mathbf{j}^2 \mathfrak{A} \mathbf{j}^2 + \mathfrak{A} \mathbf{j}^4 = 2(\mathbf{j}^2 \mathfrak{A} + \mathfrak{A} \mathbf{j}^2) - 4(\mathfrak{A} \mathbf{j}) \mathbf{j}. \quad (4)$$

Ha itt először a j -ben átlós mátrixelemeket vesszük szemügyre, úgy a bal oldalon álló zárójeles kifejezés ehhez nem ad hozzájárulást, és minthogy \mathbf{j}^2 sajátértéke $j(j+1)$, következik:

$$j(j+1) \mathfrak{A}_{j,m}^{j,m} = (\mathfrak{A} \mathbf{j})_{j,m}^{j,m} \cdot \mathbf{j}_{j,m}^{j,m}. \quad (5)$$

Az $(\mathfrak{A} \mathbf{j})$ skalárszorzat ugyanis, mint skálár, \mathbf{j} minden komponensével felcserélhető, tehát j -ben és m -ben átlós alakú. Ha másrésről egy j -ben nem-átlós elemet ($j' \neq j''$) veszünk szemügyre, úgy (4) jobb oldalán az utolsó tag nem ad hozzájárulást; kapjuk:

$$\begin{aligned} [j'^2(j'+1)^2 - 2j'(j'+1)j''(j''+1) + j''^2(j''+1)^2] \cdot \mathfrak{A}_{j',m'}^{j',m'} = \\ = 2[j'(j'+1) + j''(j''+1)] \cdot \mathfrak{A}_{j',m'}^{j',m'}. \end{aligned}$$

A bal oldalon álló zárójel:

$$[j'(j'+1) - j''(j''+1)]^2 = (j' - j'')^2 (j' + j'' + 1)^2,$$

továbbá

$$2[j'(j'+1) + j''(j''+1)] = (j' + j'' + 1)^2 + (j' - j'')^2 - 1,$$

tehát

$$[(j' + j'' + 1)^2 - 1][(j' - j'')^2 - 1] \mathfrak{A}_{j',m'}^{j',m'} = 0.$$

A mátrixelem tehát eltűnik, kivéve ha az előtte álló tényezők valamelyike tűnik el. Minthogy j', j'' mindketten nemnegatívak és minthogy $j' \neq j''$, azaz mindketten nem lehetnek zérussal egyenlők, így az első tényező nem tűnhet el; a második zárójel eltűnéséhez a $j' - j'' = \pm 1$ feltételnek kell teljesülnie. Bármely \mathfrak{A} vektorra fennáll tehát a

$$j' - j'' = \pm 1 \quad \text{vagy} \quad 0$$

kiválasztási szabály, mint azt Dirac ily módon megmutatta. Speciálisan igaz ez a koordináták, valamint \mathbf{s} és \mathbf{I} mátrixaira.

⁵ P. A. M. Dirac, Die Prinzipien der Quantentheorie, Leipzig 1930, különösen a 47. §. — Felhívjuk a figyelmet arra, hogy itt $[a, b]$ -vel az $ab - ba$ kifejezést jelöltük, míg Dirac definíciója így hangzik: $[a, b] = i(ab - ba)$. Azonkívül Dirac a $\mathbf{k}^2 = \mathbf{j}^2 + \frac{1}{4}$ jelölést használja.

A (2) egyenletek megoldása, ami a mátrixok m -függését illeti, a következő eredményt szolgáltatva:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{A}_x \pm i\mathbf{A}_y)_{j,m\mp 1}^{j,m} &= A_j^j \cdot \sqrt{(j \pm m)(j \mp m + 1)}, \\ \mathbf{A}_{z,j,m}^{j,m} &= A_j^j \cdot m, \\ (\mathbf{A}_x \pm i\mathbf{A}_y)_{j+1,m\mp 1}^{j,m} &= A_{j+1}^j \cdot [\pm \sqrt{(j \mp m + 1)(j \mp m + 2)}], \\ \mathbf{A}_{z,j+1,m}^{j,m} &= A_{j+1}^j \cdot \sqrt{(j+1)^2 - m^2}, \\ (\mathbf{A}_x \pm i\mathbf{A}_y)_{j-1,m\mp 1}^{j,m} &= A_{j-1}^j \cdot [\mp \sqrt{(j \pm m)(j \pm m - 1)}], \\ \mathbf{A}_{z,j-1,m}^{j,m} &= A_{j-1}^j \cdot \sqrt{j^2 - m^2}, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

ahol az A_j^j mennyiségek függetlenek m -től. Speciálisan j_x, j_y, j_z esetében $A_j^j = 1$ és $A_{j\pm 1}^j = 0$.

Azonkívül, hogy a (2) F.R.-at \mathbf{s} -re, \mathbf{l} -re és a helyzetvektor \mathbf{r} mátrixára alkalmazzuk, még más F.R.-at is tekintetbe kell vennünk, nevezetesen:

$$[\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y] = i\mathbf{s}_z, \dots \quad (8)$$

amelyből (1) és (2) segítségével következik:

$$[\mathbf{s}_x, \mathbf{l}] = 0, \dots, [\mathbf{l}_x, \mathbf{l}_y] = i\mathbf{l}_z, \dots \quad (8')$$

valamint

$$[\mathbf{s}_x, \mathbf{r}] = 0, \dots \quad (9)$$

Innen (1) és (2) szerint következik:

$$[\mathbf{l}_x, \mathbf{x}] = 0, \dots, [\mathbf{l}_x, \mathbf{y}] = [\mathbf{x}, \mathbf{l}_y] = i\mathbf{l}_z, \dots \quad (9')$$

Fel kell továbbá használnunk, hogy \mathbf{s}^2 -nek és \mathbf{l}^2 -nek a sajátértékei az $s(s+1)$, ill. $l(l+1)$ alakúak. Az előbbi (tehát s) az összes további megfontolás során c -számnak tekinthető, minthogy minden tekintetbe jövő mennyiség felcserélhető vele. Bár \mathbf{s} átlós I -ben, \mathbf{r} -re azonban ez nem áll. Az \mathbf{s} , ill. \mathbf{r} mátrixelemeiből (7) szerint leválasztott, m -től független tényezőt $s_{l,j}^{j,j}$ -vel ill. $a_{l,j}^{j,j}$ -vel jelöljük. Már láttuk, hogy j' -nek $j+1$ -gyel, j -vel vagy $j-1$ -gyel kell egyenlőnek lennie. Ugyanígy következik (9')-ből, hogy l' értéke csak $l+1$, l vagy $l-1$ lehet. Következő feladatunk meghatározni az $s_{l,j}^{j,j}$ és $a_{l,j}^{j,j}$ mennyiségek függését j -től és j' -től. Az elsőnek említett mennyiséggel kezdjük.

2. Az impulzusmomentum mátrixainak meghatározása. A $j' = j''$ eset (5) szerint azonnal elintézhető, azt $\mathfrak{A} = \mathbf{s}$ -re alkalmazva; kapjuk:

$$j(j+1)s_j^j = (\mathfrak{s}\mathfrak{j})_j^j$$

Fennáll:

$$\mathbf{l}^2 = (\mathbf{s} - \mathbf{j})^2 = \mathbf{s}^2 - 2(\mathfrak{s}\mathfrak{j}) + \mathbf{j}^2,$$

tehát

$$\mathfrak{s}\mathfrak{j} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^2 - \mathbf{l}^2 + \mathbf{j}^2).$$

A jobb oldalon álló mennyiségek sajátértékei azonban ismertek:

$$s_j^j = \frac{s(s+1) - l(l+1) + j(j+1)}{2j(j+1)}. \quad (10)$$

Az $s_{j+1}^j = s_j^{j+1}$ és $s_{j-1}^j = s_j^{j-1}$ mennyiségek meghatározása céljából először is felhasználjuk az

$$[\mathbf{s}_x - i\mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z]_{j,m+1}^{j,m} = (\mathbf{s}_x - i\mathbf{s}_y)_{j,m+1}^{j,m}$$

egyenletet⁶ és végeredményképpen (7) felhasználásával és az m -et tartalmazó tényezők elhagyásával kapjuk:

$$|s_{j-1}^j|^2(2j-1) - |s_{j+1}^j|^2(2j+3) + (s_j^j)^2 = s_j^j.$$

A (10) összefüggés értelmében

$$s_j^j - (s_j^j)^2 = s_j^j(1 - s_j^j) = \frac{[s(s+1) - l(l+1) + j(j+1)]}{[2j(j+1)]^2} [-s(s+1) + l(l+1) + j(j+1)];$$

az

$$A = s(s+1) - l(l+1) = (s-l)(s+l+1) \quad (a)$$

rövid jelölést bevezetve írható:

$$|s_{j-1}^j|^2(2j-1) - |s_{j+1}^j|^2(2j+3) = \frac{j^2(j+1)^2 - A^2}{[2j(j+1)]^2}. \quad (11)$$

Második egyenletként az

$$(\mathbf{s}^2)_{j,m}^{j,m} = s(s+1)$$

összefüggésből kapjuk:

$$|s_{j-1}^j|^2 j(2j-1) + |s_{j+1}^j|^2 (j+1)(2j+3) + (s_j^j)^2 j(j+1) = s(s+1)$$

behelyettesítve ide (10)-et és bevezetve a

$$B = s(s+1) + l(l+1) \quad (b)$$

rövid jelölést, az

$$|s_{j-1}^j|^2 j(2j-1) + |s_{j+1}^j|^2 (j+1)(2j+3) = \frac{-A^2 + 2Bj(j+1) - j^2(j+1)^2}{4j(j+1)} \quad (12)$$

eredményre jutunk. A (11), (12) egyenleteket megoldhatjuk $|s_{j-1}^j|^2$ -re és $|s_{j+1}^j|^2$ -re. Kapjuk:

$$\begin{aligned} |s_{j-1}^j|^2(2j+1)(2j-1) &= \frac{-j^2(j-1)(j+1)^2 - A^2(j+1) + 2Bj^2(j+1)}{4j^2(j+1)} = \\ &= \frac{-j^2(j^2-1) - A^2 + 2Bj^2}{4j^2} = \frac{-j^4 + (2B+1)j^2 - A^2}{4j^2}. \end{aligned}$$

⁶ Lényegtelen, hogy \mathbf{s} -nek mely komponenseit vesszük, és melyik mátrixelemeket az m kvantumszámra nézve.

Minthogy (b) szerint

$$2B + 1 = 2(l^2 + s^2 + l + s) + 1 = (l - s)^2 + (l + s + 1)^2,$$

(a) alapján kapjuk:

$$|s_{j-1}^j|^2 = \frac{[j^2 - (l - s)^2][(l + s + 1)^2 - j^2]}{4j^2(4j^2 - 1)}. \quad (13)$$

Ha másrésről (11)-et és (12)-t $|s_{j+1}^j|^2$ -re oldjuk meg, úgy a (13)-ból j -nek $j + 1$ -gyel való helyettesítése útján előálló kifejezést kapjuk, amint annak lennie is kell ahhoz, hogy a (11) és (12) egyenletek egymással összeférjenek. Azonkívül (13) eltűnik a „peremen”, azaz ha $j = j_{\max} + 1$ és $j = j_{\min}$, ahol tudvalevőleg $j_{\max} = l + s$ és $j_{\min} = |l - s|$.

3. *A koordináta-mátrixok meghatározása.* A koordináta-mátrixoknak, vagyis az ezekből a (7) alatt megadott, az m kvantumszámot tartalmazó gyökkifejezések leválasztása után visszamaradt $a_{l',j}^{l,j}$ tényezőnek a meghatározásához felhasználjuk a (9)-ben foglalt

$$[\mathbf{s}_x - i\mathbf{s}_y, \mathbf{z}]_{l',j',m+1}^{l,j',m} = 0$$

összefüggést, mégpedig először a $j' = j - 1, j'' = j + 1$, azután a $j' = j, j'' = j + 1$ és a $j' = j, j'' = j - 1$ helyen. Figyelembe véve, hogy \mathbf{s} átlós l -ben és elhagyva a közös tényezőket, az

$$s_{l,j}^{l,j-1} a_{l',j+1}^{l,j} = s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j}^{l,j-1} \quad (14)$$

egyenleteket kapjuk. Ez a képlet lehetővé teszi $a_{l',j+1}^{l,j}$ rekurzív meghatározását; ha s ismert, innen kiszámíthatjuk e kifejezés egymást követő j -khez tartozó értékeinek hányadosát. Látni fogjuk, hogy ezt az egyenletet könnyű analitikusan megoldani $a_{l',j+1}^{l,j}$ -re. A $j' = j, j'' = j + 1$ helyen kapjuk:

$$\begin{aligned} &+ s_{l,j}^{l,j} a_{l',j+1}^{l,j} (j - m) - s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j+1}^{l,j+1} (m + 1) \\ &+ s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j}^{l,j} \cdot m - s_{l',j+1}^{l',j+1} a_{l,j+1}^{l,j} (j + 1 - m) = 0. \end{aligned}$$

Minthogy ennek az egyenletnek minden m -re érvényesnek kell lennie, az két egyenletre bomlik, melyek azt fejezik ki, hogy az m -től független és m -mel arányos tagok külön-külön eltűnnek:

$$\left. \begin{aligned} &[+s_{l,j}^{l,j} j - s_{l',j+1}^{l',j+1} (j + 1)] a_{l',j+1}^{l,j} - s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j+1}^{l,j+1} = 0, \\ &[-s_{l,j}^{l,j} + s_{l',j+1}^{l',j+1}] a_{l',j+1}^{l,j} - s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j+1}^{l,j+1} + s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j}^{l,j} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Kivonva a második egyenletet az elsőből, kapjuk:

$$[+s_{l,j}^{l,j} (j + 1) - s_{l',j+1}^{l',j+1} (j + 2)] a_{l',j+1}^{l,j} - s_{l',j+1}^{l',j} a_{l,j}^{l,j} = 0. \quad (15')$$

Hasonlóképpen, szemügyre véve a $j' = j, j'' = j - 1$ helyet, a következő két egyenletet kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} &[s_{l,j}^{l,j} (j + 1) - s_{l',j-1}^{l',j-1} j] a_{l',j-1}^{l,j} + s_{l',j-1}^{l',j} a_{l,j-1}^{l,j-1} = 0, \\ &[s_{l,j}^{l,j} - s_{l',j-1}^{l',j-1}] a_{l',j-1}^{l,j} + s_{l',j-1}^{l',j} a_{l,j-1}^{l,j-1} - s_{l',j-1}^{l',j} a_{l,j}^{l,j} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Kivonva az első egyenletet a másodikból, kapjuk:

$$[-s_{l,j}^{l,j} + s_{l',j-1}^{l',j-1}(j-1)] a_{l',j-1}^{l,j} - s_{l',j-1}^{l',j} a_{l',j}^{l,j} = 0. \quad (16')$$

Ha (14)-ből az $a_{l',j+1}^{l,j}$ mennyiségeket meghatároztuk, úgy $a_{l',j}^{l,j}$ és $a_{l',j-1}^{l,j}$ a (15), (16) vagy a (15'), (16') képletekből megkapható.

Az $l=l'$ esetre (14)-ből mindenekelőtt következik:

$$a_{l,j+1}^{l,j} = \text{const } s_{l,j+1}^{l,j};$$

az

$$a_{l,j+1}^{l,j} = -a_l^{l,j} s_{l,j+1}^{l,j} \quad (17)$$

választással kívánunk élni, ahol az utóbbi kifejezésen (13) pozitív négyzetgyöke értendő. Ekkor kapjuk:

$$a_{l,j}^{l,j} = a_l^{l,j} \frac{l(l+1) - s(s+1) + j(j+1)}{2j(j+1)}, \quad (18)$$

$$a_{l,j-1}^{l,j} = -a_l^{l,j} s_{l,j-1}^{l,j}. \quad (19)$$

Az $l' = l-1$ esetre ezzel szemben (14)-ből (13) behelyettesítése s a közös tényezők elhagyása útján kapjuk:

$$a_{l-1,j+1}^{l,j} \frac{\sqrt{(j-l+s)(l+s+1-j)}}{2j\sqrt{(2j-1)(2j+1)}} = a_{l-1,j}^{l,j-1} \frac{\sqrt{(j-l+s+2)(l+s-1-j)}}{2(j+1)\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}.$$

E képletek megoldásának elve abban áll, hogy azokat mindkét oldalnak egyenlő tényezőkkel való kiegészítése útján az

$$a_{l-1,j+1}^{l,j} f(j-1) = a_{l-1,j}^{l,j-1} f(j)$$

alakra hozzuk, ahonnan azután

$$a_{l-1,j+1}^{l,j} = \text{const } f(j)$$

következik. Ez a tényező esetünkben $\sqrt{(j-l+s+1)(l+s-j)}$. Ily módon kapjuk:

$$a_{l-1,j+1}^{l,j} = -a_{l-1}^{l,j} \frac{\sqrt{(j-l+s+2)(j-l+s+1)(l+s-j)(l+s-1-j)}}{2(j+1)\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}. \quad (20)$$

Behelyettesítve (15')-be és (16')-be, további számítás eredményeképpen kapjuk:

$$a_{l-1,j-1}^{l,j} = a_{l-1}^{l,j} \frac{\sqrt{(j+l-s-1)(j+l-s)(l+s+1+j)(l+s+j)}}{2j\sqrt{(2j-1)(2j+1)}}, \quad (21)$$

$$a_{l-1,j}^{l,j} = a_{l-1}^{l,j} \frac{\sqrt{(j+l-s)(j-l+s+1)(l+s+1+j)(l+s-j)}}{2j(j+1)}. \quad (22)$$

Az $l' = l+1$ eset a képletek szimmetriája [a (20)–(22) egyenletekben a felső és az alsó indexek felcserélhetősége] folytán nem ad semmi újat. A kapott (17)–(22) kifejezések megegyeznek a multipllett-komponensek intenzitásaira vonatkozó ismert képletekkel.

4. *Összegszabályok. Normálás.* A nyert képletek alapján könnyű az összegszabályokat igazolni. Először is (7)-ből általánosan kapjuk valamely \mathfrak{A} vektor egy meghatározott m, j alszintről egy másik, határozott j' -vel, de tetszőleges m' -vel jellemzett alszintre vezető mátrixelemeinek négyzetösszegére, vagyis a

$$\sum_{m'}^j (|\mathbf{A}_{xj', m'}^{j, m}|^2 + |\mathbf{A}_{yj', m'}^{j, m}|^2 + |\mathbf{A}_{zj', m'}^{j, m}|^2)$$

mennyiségre, az ismert eljárással a

$$\left. \begin{aligned} \sum_j^j &= |A_j^j|^2 j(j+1), & \sum_{j+1}^j &= |A_{j+1}^j|^2 (j+1)(2j+3), \\ \sum_{j-1}^j &= |A_{j-1}^j|^2 j(2j-1) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

kifejezéseket. (Vegyük tekintetbe, hogy a $\sum_{j'}^j$ mennyiségek, ellentétben az $A_{j'}^j$ mennyiségekkel, *nem* szimmetrikusok a felső és az alsó indexben.)

Ha rögzített j, m kezdeti állapot mellett még a végállapot j' értékeire is összegezzünk, (a koordináta mátrixelemei esetében) kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{l'}^l &= \sum_{l', j}^{l, j} + \sum_{l', j+1}^{l, j} + \sum_{l', j-1}^{l, j}; \\ \text{ha } l' &= l & \sum_l^l &= |a_l^l|^2 l(l+1), \\ \text{ha } l' &= l-1 & \sum_{l-1}^l &= |a_{l-1}^l|^2 l(2l-1), \\ \text{ha } l' &= l+1 & \sum_{l+1}^l &= |a_{l+1}^l|^2 (l+1)(2l+3). \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Ezek az összegek tehát a kezdeti szint j, m kvantumszámaitól függetlenek. Analóg szabály érvényes, hasonló képletekkel, tudvalevőleg akkor is, ha rögzített végállapot mellett a kezdeti állapotokra összegezzünk.

A $\sum_{l'}^l$ összegek értékének ismerete lehetővé teszi, hogy összehasonlítsuk a koordináták (és impulzuszómomentumok) átlós \mathbf{j}^2 (és \mathbf{j}_z), valamint átlós \mathbf{s}_z (és \mathbf{j}_z , s így egyezersmind \mathbf{l}_z) mellett képzett mátrixelemeit. Az utóbbiak a Zeeman-effektus esetében az erős terek határesetének felelnek meg. Ha $m_s, m_l, m = m_l + m_s$ [ahol $-s \leq m_s \leq s, -l \leq m_l \leq l$] a szokott módon $\mathbf{s}_z, \mathbf{l}_z, \mathbf{j}_z$ sajátértékeit jelölik, úgy ebben az esetben a koordináták (m_s -ben szükségképpen átlós alakú) mátrixelemeit közvetlenül megadják az alábbi (7) típusú képletek:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{x} \pm i\mathbf{y})_{l, m_l \mp 1}^{l, m_l} &= a_l^l \sqrt{(l \pm m_l)(l \mp m_l + 1)}, \\ \mathbf{z}_{l, m_l}^{l, m_l} &= a_l^l m_l, \\ (\mathbf{x} \pm i\mathbf{y})_{l-1, m_l \mp 1}^{l, m_l} &= a_{l-1}^l [\mp \sqrt{(l \pm m_l)(l \pm m_l - 1)}], \\ \mathbf{z}_{l-1, m_l}^{l, m_l} &= a_{l-1}^l \sqrt{l^2 - m_l^2}, \\ (\mathbf{x} \pm i\mathbf{y})_{l+1, m_l \mp 1}^{l, m_l} &= a_{l+1}^l [\pm \sqrt{(l \mp m_l + 1)(l \mp m_l + 2)}], \\ \mathbf{z}_{l+1, m_l}^{l, m_l} &= a_{l+1}^l \sqrt{(l+1)^2 - m_l^2}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Az $\mathbf{l}_x, \mathbf{l}_y, \mathbf{l}_z$ mátrixelemeire vonatkozó képleteket innen az $a_l^l = 1, a_{l+1}^l = a_{l-1}^l = 0$ értékek behelyettesítésével kapjuk, $\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z$ mátrixelemei pedig oly módon adódnak $\mathbf{l}_x, \mathbf{l}_y, \mathbf{l}_z$ mátrixelemeiből, hogy azokban l, m_l helyére mindenütt s -et, ill. m_s -et írunk.

E mátrixelemek közül azoknak, amelyek rögzített l, m_l kezdeti állapotból a rögzített l' -vel jellemzett, de egyébként tetszőleges végállapotba vezetnek, az abszolútérték-négyzetösszegét (23)-hoz hasonló módon kiszámíthatjuk (csupán j -t és m -et kell l -lel és m_l -lel helyettesíteni), s az eredmény pontosan megegyezik a (24) összegekkel. Ez feljogosít bennünket arra, hogy a (25) alatt fellépő a_l^j mennyiségeket egyenlővé tegyük a koordináta-mátrixok átlós j mellett érvényes (17)–(22) kifejezéseiben szereplő a_l^j mennyiségekkel. Ha ezeket egyenlővé tettük, úgy a gyenge terekben megadott valamennyi mátrixelemnek (j^2 átlós) az erős terekhez tartozó mátrixelemekből (l_z átlós) unitér transzformáció útján — melyet egy $S_{m_l}^j$ unitér mátrix⁷ ír le — kell előállnia.

II. A mátrixelemek három impulzuszómomentum összeadása esetén. Munkánkhoz szükségünk van bizonyos mátrixelemekre, melyek arra az esetre vonatkoznak, amikor három impulzuszómomentumot adunk össze: az s elektronspint, az l pályazómomentumot és az i magmomentumot. Az eredőt jelölje $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s} + \mathbf{i} = \mathbf{j} + \mathbf{i}$, ahol ismét a $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ jelölést alkalmaztuk. Célszerű i^2, s^2, l^2, f^2 és f_z mellett [a sajátértékek rendre $i(i+1), s(s+1), l(l+1), f(f+1)$ és m (az utóbbi kvantumszám tehát most már nem j_z -nek felel meg); i^2 és s^2 számnak tekinthető] még j^2 -et, melynek sajátértékeit $j(j+1)$ jelöli, átlós alakra hozni. Ahhoz, hogy a mátrixelemeket erre az esetre megadhatassuk, nem szükséges új számítást végezni; az eredmény az I. részben megadott képletek kétszeri alkalmazásával adódik. A F.R. s és r , valamint $\mathbf{j}, \mathbf{i}, \mathbf{j}; f^2, i^2, j^2$ között ugyanis hasonlóak az r és $\mathbf{j}, s, l; j^2, s^2, l^2$ mennyiségek között fennálló F.R.-hoz. Az

$$s_{(l), j, m_j}^{(l), j, f, m_f} \rightarrow s_{(l), j', f', m_f'}^{(l), j, f, m_f} \quad \text{és} \quad r_{(l'), j', f', m_f'}^{(l), j, m_j} \rightarrow r_{(l'), j', f', m_f'}^{(l), j, f, m_f}$$

unitér transzformációk tehát mind a ketten analogonjai az

$$r_{l', m_l'}^{l, m_l} \rightarrow r_{l', j', m_j'}^{l, j, m_j}$$

transzformációnak. A végeredményeket a következő összeállítás mutatja.

$$\begin{aligned} i_{z, l, j, f, m}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f}^{l, j, f} &= s_{z, l, j, f, m}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f}^{l, j, f} = z_{l', j', f, m}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f}^{l, j, f} = m, \\ (i_x \pm i i_y)_{l, j, f, m \mp 1}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f}^{l, j, f} &= (s_x \pm i s_y)_{l, j, f, m \mp 1}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f}^{l, j, f} \\ &= (x \pm i y)_{l', j', f, m \mp 1}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f}^{l, j, f} = \sqrt{(f \pm m)(f \mp m + 1)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i_{z, l, j, f+1, m}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f+1}^{l, j, f} &= s_{z, l, j, f+1, m}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f+1}^{l, j, f} = z_{l', j', f+1, m}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f+1}^{l, j, f} = \sqrt{(f+1)^2 - m^2}, \\ (i_x \pm i i_y)_{l, j, f+1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f+1}^{l, j, f} &= (s_x \pm i s_y)_{l, j, f+1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f+1}^{l, j, f} \\ &= (x \pm i y)_{l', j', f+1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f+1}^{l, j, f} = \pm \sqrt{(f \mp m + 1)(f \mp m + 2)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i_{z, l, j, f-1, m}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f-1}^{l, j, f} &= s_{z, l, j, f-1, m}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f-1}^{l, j, f} = z_{l', j', f-1, m}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f-1}^{l, j, f} = \sqrt{f^2 - m^2}, \\ (i_x \pm i i_y)_{l, j, f-1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / i_{l, j, f-1}^{l, j, f} &= (s_x \pm i s_y)_{l, j, f-1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / s_{l, j, f-1}^{l, j, f} \\ &= (x \pm i y)_{l', j', f-1, m \mp 1}^{l, j, f, m} / a_{l', j', f-1}^{l, j, f} = \mp \sqrt{(f \pm m)(f \pm m - 1)}. \end{aligned}$$

⁷ Eddig nem sikerült ezen mátrix elemekre vonatkozóan zárt analitikus képleteket felállítani.

$$i_{l,j,f}^{l,j,f} = \frac{i(i+1) - j(j+1) + f(f+1)}{2f(f+1)},$$

$$i_{l,j,f+1}^{l,j,f} = \frac{\sqrt{(f+j-i+1)(f-j+i+1)(j+i+2+f)(j+i-f)}}{2(f+1)\sqrt{(2f+1)(2f+3)}},$$

$$i_{l,j,f-1}^{l,j,f} = \frac{\sqrt{(f+j-i)(f-j+i)(j+i+1+f)(j+i+1-f)}}{2f\sqrt{(2f-1)(2f+1)}}.$$

$$s_{l,j,f}^{l,j,f}/s_{l,j}^{l,j} = a_{l',j,f}^{l,j,f}/a_{l',j}^{l,j} = \frac{j(j+1) - i(i+1) + f(f+1)}{2f(f+1)},$$

$$s_{l,j,f+1}^{l,j,f}/s_{l,j}^{l,j} = a_{l',j,f+1}^{l,j,f}/a_{l',j}^{l,j} = -\frac{\sqrt{(f+j-i+1)(f-j+i+1)(j+i+2+f)(j+i-f)}}{2(f+1)\sqrt{(2f+1)(2f+3)}},$$

$$s_{l,j,f-1}^{l,j,f}/s_{l,j}^{l,j} = a_{l',j,f-1}^{l,j,f}/a_{l',j}^{l,j} = -\frac{\sqrt{(f+j-i)(f-j+i)(j+i+1+f)(j+i+1-f)}}{2f\sqrt{(2f-1)(2f+3)}}.$$

$$s_{l,j-1,f}^{l,j,f}/s_{l,j-1}^{l,j} = a_{l',j-1,f}^{l,j,f}/a_{l',j-1}^{l,j} = \frac{\sqrt{(f+j-i)(f-j+i+1)(j+i+1+f)(j+i-f)}}{2f(f+1)},$$

$$s_{l,j-1,f+1}^{l,j,f}/s_{l,j-1}^{l,j} = a_{l',j-1,f+1}^{l,j,f}/a_{l',j-1}^{l,j} = -\frac{\sqrt{(f-j+i+2)(f-j+i+1)(j+i-f)(j+i-1-f)}}{2(f+1)\sqrt{(2f+1)(2f+3)}},$$

$$s_{l,j-1,f-1}^{l,j,f}/s_{l,j-1}^{l,j} = a_{l',j-1,f-1}^{l,j,f}/a_{l',j-1}^{l,j} = \frac{\sqrt{(f+j-i-1)(f+j-i)(j+i+1+f)(j+i+f)}}{2f\sqrt{(2f-1)(2f+1)}}.$$

$$s_{l,j+1,f}^{l,j,f}/s_{l,j+1}^{l,j} = a_{l',j+1,f}^{l,j,f}/a_{l',j+1}^{l,j} = \frac{\sqrt{(f+j-i+1)(f-j+i)(j+i+2+f)(j+i+1-f)}}{2f(f+1)},$$

$$s_{l,j+1,f+1}^{l,j,f}/s_{l,j+1}^{l,j} = a_{l',j+1,f+1}^{l,j,f}/a_{l',j+1}^{l,j} = \frac{\sqrt{(f+j-i+1)(f+j-i+2)(j+i+3+f)(j+i+2+f)}}{2(f+1)\sqrt{(2f+1)(2f+3)}},$$

$$s_{l,j+1,f-1}^{l,j,f}/s_{l,j+1}^{l,j} = a_{l',j+1,f-1}^{l,j,f}/a_{l',j+1}^{l,j} = -\frac{\sqrt{(f-j+i)(f-j+i-1)(j+i+2-f)(j+i+1-f)}}{2f\sqrt{(2f+1)(2f-1)}}.$$

$$s_{l,j}^{l,j} = \frac{s(s+1) - l(l+1) + j(j+1)}{2j(j+1)}, \quad a_{l,j}^{l,j} = a_l^l \frac{l(l+1) - s(s+1) + j(j+1)}{2j(j+1)},$$

$$s_{l,j-1}^{l,j} = -a_{l,j-1}^{l,j}/a_l^l = \frac{\sqrt{(j+l-s)(j-l+s)(l+s+1+j)(l+s+1-j)}}{2j\sqrt{(2j-1)(2j+1)}},$$

$$s_{l,j+1}^{l,j} = -a_{l,j+1}^{l,j}/a_l^l = \frac{\sqrt{(j+l-s+1)(j-l+s+1)(l+s+2+j)(l+s-j)}}{2(j+1)\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}.$$

$$a_{l-1,j}^{l,j}/a_{l-1}^l = \frac{\sqrt{(j+l-s)(j-l+s+1)(l+s+1+j)(l+s-j)}}{2j(j+1)},$$

$$a_{l-1,j-1}^{l,j}/a_{l-1}^l = \frac{\sqrt{(j+l-s-1)(j+l-s)(l+s+1+j)(l+s+j)}}{2j\sqrt{(2j-1)(2j+1)}},$$

$$a_{l-1,j+1}^{l,j}/a_{l-1}^l = -\frac{\sqrt{(j-l+s+2)(j-l+s+1)(l+s-j)(l+s-1-j)}}{2(j+1)\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}.$$

$$a_{l+1,j}^{l,j}/a_{l+1}^l = \frac{\sqrt{(j+l-s+1)(j-l+s)(l+s+2+j)(l+s+1-j)}}{2j(j+1)},$$

$$a_{l+1,j-1}^{l,j}/a_{l+1}^l = -\frac{\sqrt{(j-l+s)(j-l+s-1)(l+s+2+j)(l+s+1-j)}}{2j\sqrt{(2j-1)(2j+1)}},$$

$$a_{l+1,j+1}^{l,j}/a_{l+1}^l = \frac{\sqrt{(j+l-s+1)(j+l-s+2)(l+s+3+j)(l+s+2+j)}}{2(j+1)\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}.$$

Munkánkhoz szükségesek továbbá \mathbf{i} és \mathbf{s} skalárszorzatának, (\mathbf{is}) -nek a mátrix-elemei, mivel a mag és az elektron perturbációs energiája ezzel a mennyiséggel arányos. Az I. részben megadott (2), (3) F.R. továbbra is érvényesek, ha azokban \mathbf{j} -t \mathbf{f} -fel helyettesítjük. Így tehát (\mathbf{is}) mint skalár f -ben és m -ben diagonális. Minthogy továbbá \mathbf{i} átlós j -ben, kapjuk:

$$(\mathbf{is})_{j',f}^{j,f} = i_{j,f}^{j,f} s_{j',f}^{j,f} f(f+1) + i_{j,f+1}^{j,f} s_{j',f}^{j,f+1} (f+1)(2f+3) + i_{j,f-1}^{j,f} s_{j',f}^{j,f-1} f(2f-1). \quad (26)$$

A j -ben átlós mátrixelemet ($j'=j$) a legegyszerűbben az I. rész (5) egyenletéből kapjuk meg, ha azt $\mathbf{s}_{f,m}^{j,m}$ -re alkalmazzuk; a többi mátrixelemet ($j'=j-1$ és $j'=j+1$) behelyettesítéssel és közvetlen számítással kaphatjuk meg. A végeredmény:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{is})_{j-1,f}^{j,f} &= s_{l,j-1}^{l,j} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{(f+j-i)(f-j+i+1)(j+i+1-f)(j+i-f)}, \\ (\mathbf{is})_{j+1,f}^{j,f} &= s_{l,j+1}^{l,j} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{(f+j-i+1)(f-j+i)(j+i+2+f)(j+i+1-f)}, \\ (\mathbf{is})_{j,f}^{j,f} &= s_{l,j}^{l,j} \cdot \frac{1}{2} [f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)]. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

A IUPAP HÍREI

Az 1971-es konferenciák jegyzéke

Commission on Thermodynamics and Statistical Mechanics

- | | | | |
|---|-----|----------------------|----------------------|
| 1. Int. Conf. on Statistical Mechanics | ‘A’ | Chicago
U.S.A. | 29 March—
2 April |
| Organizer: Prof. Stuart A. Rice, University of Chicago, The James Franck Institute, 5640, Ellis Avenue, Chicago, Illinois 60637, U.S.A. | | | |
| 2. Conf. on Theoretical Physics and Biology | ‘C’ | Versailles
FRANCE | 21—26 June |
| Organizer: Prof. M. Marois, Institut de la Vie, 89, boulevard St-Michel, Paris V, FRANCE. | | | |

Commission on Cosmic Rays

- | | | | |
|---|-----|--------------------|--------------|
| 3. 12th Int. Conf. on Cosmic Rays | ‘A’ | Hobart
TASMANIA | 16—25 August |
| Organizer: Drs. K. B. and A. G. Fenton, University of Tasmania, Department of Physics, Box 252 C, GPO Hobart, Tasmania 7001, AUSTRALIA. | | | |

Commission on Acoustics

- | | | | |
|---|-----|---------------------|--------------|
| 4. 7th Int. Conf. on Acoustics | ‘A’ | Budapest
HUNGARY | 18—26 August |
| Organizer: Prof. T. Tarnoczy, Acoustical Research Group, Puskin u. 5—7, Budapest VIII, HUNGARY. | | | |

Commission on Semiconductors

- | | | | |
|---|-----|----------------------|-------------|
| 5. Int. Conf. on Amorphous and Liquid Semiconductors | ‘B’ | Ann. Arbor
U.S.A. | 8—13 August |
| Organizer: Prof. Morrel H. Cohen, The James Franck Institute, 5640, Ellis Avenue South, Chicago, Illinois 60637, U.S.A. | | | |

Commission on Solid State

- | | | | |
|--|-----|---------------------|-----------------|
| 6. Int. Conf. on Crystals Growth | ‘B’ | Marseille
FRANCE | 5—9 July |
| Organizer: Dr. Muftachiev, University of Marseille, Marseille, FRANCE. | | | |
| 7. Int. Conf. for Solid Surfaces | ‘B’ | Boston
U.S.A. | 11—18 October |
| Organizer: Prof. C. B. Duke, Department of Physics, University of Illinois, Urbana, Illinois 61801, U.S.A. | | | |
| 8. Conf. on Colour Centres in Ionic Crystals | ‘B’ | Reading
ENGLAND | 13—17 September |
| Organizer: Prof. E. W. J. Mitchell, J. J. Thomson Physical Laboratory, Whiteknights Park, Reading, Berks., ENGLAND. | | | |
| 9. Int. Conf. on Light Scattering in Solids | ‘B’ | Paris
FRANCE | 19—23 July |
| Organizer: Prof. M. Balkanski, Laboratoire de Physique des Solides, Tour 13, 2ième étage, Faculté des Sciences, 9, Quai St-Bernard, Paris V ^e , FRANCE. | | | |

Commission on Particles and Fields

- | | | | |
|---|-----|---------------------|-----------------|
| 10. VIIIth Int. Conf. on High Energy Accelerators | ‘B’ | CERN
SWITZERLAND | 20—24 September |
| Organizer: Dr. K. Johnson, CERN, 1211 Geneva 23, SWITZERLAND. | | | |
| 11. Int. Conf. on Electron and Photon Interactions at High Energies | ‘B’ | Ithaca
U.S.A. | 23—28 August |
| Organizer: Prof. B. D. McDaniel, Laboratory of Nuclear Studies, Cornell University, Ithaca, N. Y. 14850, U.S.A. | | | |

12. Int. Conf. on Duality and Symmetry in Hadron Physics 'B' Tel-Aviv ISRAEL 5—7 April
Organizer: Prof. *Y. Ne'eman*, Dept. of Physics and Astronomy, Tel-Aviv University, Ramat-Aviv, Tel-Aviv, ISRAEL.
13. Int. Conf. on High Energy Physics and Nuclear Structure 'B' Dubna U. S. S. R. 7—12 September
Organizer: Prof. *V. P. Dzhelepov*, Lab. of Nuclear Problems, Joint Institute for Nuclear Research, Head Post Office Box 79, Moscow, U.S.S.R.
- Commission on Nuclear Physics*
14. Conf. on Statistical Properties of Nuclei 'B' Albany U.S.A. 23—27 August
Organizer: Dr. *Jagdish B. Garg*, Physics Department, SUNY at Albany, 1400 Washington Avenue, Albany, N. Y. 12203, U. S. A.
- Commission on Atomic Masses and Related Constants*
15. IVth Int. Conf. on Atomic Masses and Related Fundamental Physical Constants 'B' Teddington ENGLAND 6—10 September
Organizer: Prof. *E. Richard Cohen*, Science Center, North American Rockwell Corporation, 1049, Camino Dos Rios, Thousand Oaks, California 91360, U.S.A.
- Commission on Atomic and Molecular Physics and Spectroscopy*
16. 3rd Int. Conf. on Vacuum UV Radiation Physics 'B' Tokyo JAPAN 30 August—2 September
Organizer: Prof. *Kaza Ishiguro*, University of Tokyo, College of General Education, Komaba, Tokyo 113, JAPAN.
17. VIth Int. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 'A' Amsterdam NETHERLANDS 26—31 July
Organizer: Prof. Dr. *J. Kistemaker*, FOM-Instituut voor Atoom- en Molecuulfysica, Kruislaan 407, Amsterdam-Watergraafsmeer, NETHERLANDS.
- Commission on Plasma Physics*
18. Xth Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases 'B' Oxford ENGLAND 13—18 September
Organizer: Dr. *R. N. Franklin*, Keble College, Oxford, ENGLAND.
19. Int. Symposium on Plasma Physics 'C' Est. CANADA July
Organizer: Dr. *M. P. Bachynski*, RCA Laboratories, 1001, Lenoir, Montréal, P. Q. CANADA
- Relativity*
20. 7th Int. Conf. on General Relativity and Gravitation 'A' Copenhagen DENMARK July
Organizer: Prof. *C. Møller*, NORDITA, Blegdamsvej 17, DK—2100, Copenhagen Ø, DENMARK

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária

A kézirat beérkezett: 1970. IX. 9. — Terjedelem: 9,10 (A/5) ív

70-4632 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491

TARTALOMJEGYZÉK

oldal

<i>Farkas Győző, Kiss Gábor és Ritvay Miklósné</i> : Rubinlaser mode-locking üzemmódjának megvalósítása és a kapott nagyintenzitású pikoszekundumos impulzusok időtartamának mérése	1
<i>Krasznovszky Sándor, Pintér György és Telbisz Ferenc</i> : Spin-paritás meghatározás multipólus momentumok segítségével	13
<i>Kertész Iván</i> : Ultrarövid laser-impulzusok	31
<i>Lendvai Ödön</i> : Kristályfelületek és diszlokációk tanulmányozása maratással	43

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>B. L. van der Waerden</i> : Folytonossági tételek félig egyszerű Lie-csoportokra	87
<i>P. Güttinger és W. Pauli</i> : A Li^+ hiperfinomszerkezetéről	93

KÖNYVISMERTETÉS

<i>R. Klötzler</i> : Mehrdimensionale Variationsrechnung, Birkhauser Verlag, 1970. (T. Gy.)	30
---	----

A IUPAP HÍREI

Az 1971-es konferenciák jegyzéke	103
--	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

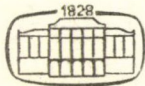
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelmében.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus

Budapest, XII., Konkoly Thege út

Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ERŐS CSATOLÁSÚ ÉS ANIZOTRÓP SZUPRAVEZETŐK MIKROSZKOPIKUS ELMÉLETE A KRITIKUS HŐMÉRSÉKLET KÖZELÉBEN, MÁGNESES TÉR JELENLÉTÉBEN*

MENYHÁRD NÓRA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	
I. A fenomenologikus Ginzburg—Landau egyenletek	
II. A mikroszkopikus elmélet gyenge csatolású, izotróp szupravezetőkre	
1. A Ginzburg—Landau egyenletek Gorkov-féle származtatása	
2. Általánosított Ginzburg—Landau egyenletek származtatása	
III. Erős csatolású Ginzburg—Landau egyenletek	
1. Erős csatolású szupravezetők egyenletei mágneses tér jelenléte esetén	
2. Erős csatolású egyenletek $T \lesssim T_c$ -nél	
3. Az erős csatolású Ginzburg—Landau egyenletek paramétereinek diszkussziója	
4. A határfeltétel levezetése	
IV. Kristály anizotrópia hatása szupravezetők mágneses térbeli viselkedésére	
1. Anizotrópia effektusok szupravezetőkben	
2. Effektív elektron-elektron kölcsönhatás származtatása az elektron-fonon kölcsönhatásból kiindulva, kristályanizotrópia figyelembevételével	
3. Anizotróp szupravezetők egyenletei külső mágneses térben	
4. Anizotróp szupravezetők egyenletei mágneses tér jelenlétében $T \lesssim T_c$ esetén	
Függelék. A Ginzburg—Landau elmélet érvényességéről a kritikus pont közelében	

Bevezetés

A szupravezetés elméletében a fenomenologikus Ginzburg—Landau egyenletek [1] igen lényeges szerepet játszanak: a szupravezető állapot leírását adják a fázisátmeneti pont közelében külső mágneses tér jelenléte esetén. Az elmúlt 6—8 évben a szupravezetők fizikájában elért újabb eredmények legnagyobb része kapcsolatos a Ginzburg—Landau elmélettel: az egyenletek különféle fizikai körülmények, geometriák stb. esetére való megoldásai kapcsán egy sereg jelenség felfedezése, ill. magyarázata vált lehetségessé, így — hogy csak a legfontosabbat említsük — az ún. London-típusú szupravezetők mágneses viselkedésének értelmezése.

Az elmélet mikroszkopikus megalapozására a *Bardeen, Cooper, Schrieffer* [2] (a továbbiakban BCS) elmélet felállítását követően került sor. *Gorkov* [3] elsőként tudta a rendparaméter mikroszkopikus értelmezését adni és az elmélet fenomenologikus állandóit a BCS elmélet alapján leszármaztatni. Továbbá meghatározta az elmélet érvényességének korlátait is. Később a Ginzburg—Landau—Gorkov elméletnek különféle általánosításai váltak ismertté: egyes szerzők [4], [5], [6], [7], az elmélet alacsonyabb hőmérsékleten is érvényes változatát dolgozták ki, mások a levezetés érvényességét általánosabb fizikai körülményekre terjesztették ki, mint pl. szennye-

* Érkezett 1970. júl. 30.

zések jelenléte [8], [9]. Mindezen elméletek azonban lényegében a BCS elméletet használták kiindulópontul, mely a kvázirészek között a Fermi felület környezetében konstans, nem retardált kétrészecske kölcsönhatás feltételezésén alapul. Ismeretes, hogy az ún. erős csatolású szupravezetők, mint Pb, Hg, esetében a BCS elméletnél általánosabb elmélet [10] kidolgozása vált szükségessé, hogy különféle kísérleti tényeket magyarázni lehessen. Így pl. a szupravezető állapotsűrűség energiahűggsében észlelt struktúra arra mutatott, hogy az effektív kölcsönhatás fonon-kicsérélődésből származó részének retardációja lényeges szerepet játszik [11]. A BCS elmélet egy további fogyatéka, hogy a kristály anizotrópia következményeit nem veszi figyelembe és így bizonyos erősen anizotróp szupravezető tulajdonságokat mutató anyagok esetében nem alkalmazható.

Mindezek arra indították a szerzőt, hogy a Ginzburg—Landau egyenletek mikroszkopikus elméletét általánosabb keretek között vizsgálja. Így a konstans BCS kölcsönhatás helyett egy általános, fononkicsérélődésből származó, frekvenciafüggő effektív elektron-elektron kölcsönhatásból kiindulva leszámaztattuk az erős csatolású szupravezetők mágneses térben $T \lesssim T_c$ esetén való viselkedését leíró egyenleteket [12]. Egyrészt azt találtuk, hogy a Ginzburg—Landau egyenletek erős csatolású szupravezetőkre is érvényesek az átmeneti hőmérséklet közelében, ami fizikailag annak a következménye, hogy a részecskepár relatív és tömegközépponti szabadsági fokai mozgása függetlenné válik T_c -hez közeledve, másrészt viszont az elmélet paraméterei megváltoznak a gyenge csatolású esethez képest. Megadtuk a paraméterek általános kifejezéseit és rámutattunk arra, hogy meghatározásuk az erős csatolású problémát zérus külső mágneses tér esetén leíró függvények segítségével történhet. Ezen vizsgálatok kiegészítéseként most azt is bebizonyítjuk, hogy az erős csatolású esetre való áttérésnél a Ginzburg—Landau egyenleteket kiegészítő határfeltétel alakja is változatlan marad, nemcsak a Ginzburg—Landau egyenleteké, amiből következik, hogy a H_{c_2} és H_{c_3} kritikus mágneses terek hányadosának az értéke erős csatolású szupravezetőknél is ugyanaz az univerzális állandó, mint gyenge csatolásúaknál.

Az erős csatolású Ginzburg—Landau problémával kapcsolatban 1967-ben Eilenberger és Ambegaokar [13], valamint Yorke és Bardasis [14] is végeztek vizsgálatokat, akik más módszert* használva a szerző 1966-os eredményével [12] egyező eredményt kaptak a Ginzburg—Landau egyenleteket illetően. Ők a H_{c_2} -re kapott kifejezés numerikus kiértékelését is elvégezték ólom esetére.

Az erős csatolású szupravezetők problémája mellett a szerző vizsgálatainak további tárgya az anizotrópia effektusok figyelembevétele volt. Anizotróp szupravezetőkre a fenomenologikus Ginzburg—Landau egyenletek megfelelőjét Ginzburg [15] adta meg. A Ginzburg-féle egyenletekben a Ginzburg—Landau egyenletekben szereplő skalár tömeg helyett tömegtenzor szerepel. A Ginzburg egyenletek első levezetése a mikroszkopikus elmélet alapján Gorkov és Melik—Barkhudarov [16] nevéhez fűződik, akik anizotróp egy-elektron energiákból indultak ki és egy konkrét formában meg nem adott anizotróp kölcsönhatást tételtek fel.

Mi a Gorkov és Melik—Barkhudarov-énál több szempontból is általánosabb vizsgálatot végeztünk el a szupravezetők mágneses térbeli viselkedésében megnyilvánuló anizotrópia effektusokkal kapcsolatosan [17], [18]. Egy általános, mérték-

* Ez a módszer a Gorkov-félének az általánosítása. Hátránya, a szerző által használt módszerrel szemben, hogy anizotrópia effektusok figyelembevételére nem alkalmas.

invariáns, nem-retardált két-részecske kölcsönhatásból kiindulva olyan egyenleteket vezettünk le, melyek nemcsak T_c közvetlen közelében, hanem alacsonyabb hőmérsékleteken is érvényesek London típusú anizotróp szupravezetőkre. A jelen dolgozatban meghatározzuk az anizotróp effektív elektron-elektron kölcsönhatás konkrét alakját is az elektron-fonon kölcsönhatásból kiindulva, kristályanizotrópia effektusokat is figyelembe véve, majd ezen kölcsönhatás segítségével származtatjuk a $T \lesssim T_c$ -nél érvényes egyenleteket. Míg Ginzburg—Gorkov—Melik—Barkhudarovnál az áram és gap egyenleteiben szereplő tömegtenzorok egyformák, mi arra az eredményre jutottunk, hogy ezen két egyenletben általában különböző tömegtenzorok lépnek fel. A két tömegtenzor különbözőségét a kristály anizotrópiának az effektív kölcsönhatáson keresztül való megnyilvánulása okozza. Rámutatunk arra, hogy H_{c2} , valamint a behatolási mélység két, egymásra merőleges, tér esetén való mérése révén a tömegtenzorok eltérése kimérhető lehet.

Az *első fejezetben* a fenomenologikus Ginzburg—Landau elmélet ismertetését adjuk. Foglalkozunk az egyenletekben szereplő paraméterek fizikai jelentésével, a szupravezetők osztályozásával az ún. Ginzburg—Landau paraméter nagysága szerint és a H_c , H_{c1} , H_{c2} és H_{c3} kritikus mágneses terek definíciójával. Végül a Ginzburg—Landau elmélet anizotróp esetre való Ginzburg-féle általánosítását ismertetjük.

A *második fejezet* a Ginzburg—Landau egyenletek és általánosításaik gyenge csatolású és izotróp szupravezetőkre vonatkozó levezetéseiivel foglalkozik. A Gorkovtól [3] származó levezetés ismertetése után a Werthamer [4] és Zumino, Uhlenbrock [3] módszert tárgyaljuk. Megadjuk a Werthamer [4] féle általánosított Ginzburg—Landau egyenleteket, melyek London típusú szupravezetők esetén T_c -nél lényegesen alacsonyabb hőmérsékleteken is érvényesek.

A *harmadik fejezet* tárgyalja az erős csatolású szupravezetők mágneses térben való viselkedésének problémáját. Az erős csatolású Ginzburg—Landau egyenletek elektron-fonon kölcsönhatásból kiinduló levezetése után az egyenlet paramétereinek diszkussziója következik, majd a határfeltétel levezetése zárja a fejezetet.

A *negyedik fejezetben* azt vizsgáljuk, hogy a kristály anizotrópia figyelembevétele milyen effektusokhoz vezet szupravezetők mágneses térben való viselkedése szempontjából. Az effektív elektron-elektron kölcsönhatásnak az egy-fonon kicserélődésből, a kristály anizotrópia tekintetbe vételével való leszármaztatása után egyenleteket vezetünk le, melyek anizotróp, London típusú szupravezetők T_c -nél lényegesen alacsonyabb hőmérsékleten való leírására alkalmasak, majd ezen egyenletek $T \lesssim T_c$ -re vonatkozó alakját vizsgáljuk meg és rámutatunk az anizotrópia különféle forrásainak szupravezetők mágneses térbeli viselkedésében való megnyilvánulásaira. Ennek kapcsán diszkutáljuk azt az eredményt, hogy az áram és gap egyenleteiben szereplő tömegtenzorok általában különbözők.

A *Függelékben* megvizsgáljuk a Ginzburg—Landau elmélet érvényességét a fluktuációk szempontjából. Ginzburg [49] számolását általánosítjuk azzal, hogy figyelembe vesszük a rendparaméter fázisának fluktuációit is. Eredményünk szerint a Ginzburg—Landau elmélet $(T_c - T)/T_c \gg 10^{-13}$ hőmérsékleten érvényes, amely a kritikus hőmérséklettől két nagyságrenddel távolabb levő korlátot jelent az elmélet alkalmazhatóságára mint ami csak az abszolút érték fluktuációjának figyelembe vételével kapható. A kritikus tartomány, melyen belül az elmélet már nem érvényes a fluktuációk túlságosan nagygyá válása miatt, azonban így is messze a mérhetőség határán kívül esik szupravezetők esetében.

I. A fenomenologikus Ginzburg—Landau egyenletek

1950-ben Ginzburg és Landau [1] fenomenologikus elméletet állítottak fel mágneses térbe helyezett szupravezetők viselkedésének leírására a kritikus hőmérséklethez közeli hőmérsékletekre a másodrendű fázisátmenetek Landau-féle elméletét [19] véve alapul. A szupravezető állapotot egy $\psi(\mathbf{R})$ komplex rendparaméterrel jellemezték oly módon, hogy $|\psi|^2$ a szupravezetésben részt vevő „szuperelektronok” sűrűségét adja, mely zérushoz tart a T_c kritikus hőmérsékleten. ψ fizikai jelentése még nem volt világos abban az időben. Plauzibilitási argumentumok alapján Ginzburg és Landau a következő szabadenergia-funkcionált írták fel:

$$F = \int d^3R \left[f_s(\mathbf{R}) + \delta \left| \text{grad} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right| \psi \right|^2 + \frac{H^2(R)}{8\pi} \right], \quad (\text{I. 1})$$

ahol $f_s(\mathbf{R})$ a fém szabadenergia-sűrűsége zérus külső mágneses tér esetén, $H^2/8\pi$ a mágneses energiasűrűség; δ konstans, melyet $\hbar^2/2m$ -nek választottak (m az elektron tömege) és e^* a „szuperelektronok” effektív töltése. Ginzburg és Landau feltételezték, hogy a kritikus hőmérséklethez közeli hőmérsékletek esetén, amikor is $|\psi|^2$ kicsi, $f_s(\mathbf{R})$ hatványsorba fejthető $|\psi|^2$ szerint:

$$f_s(\mathbf{R}) = f_n + \alpha(T)|\psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\psi|^4 + \dots \quad (\text{I. 2})$$

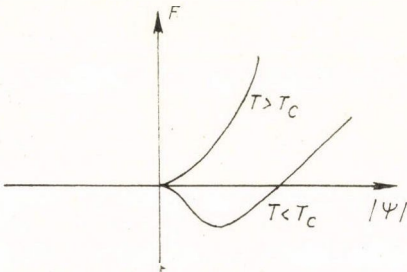
ahol f_n a normál állapotú fém szabadenergia-sűrűsége, mely — feltevés szerint — független a helytől; α és β hőmérséklet — (és nyomás) függő állandók. (Ezen kifejtés érvényességének korlátaira még a későbbiekben kitérünk.)

Zérus külső mágneses tér esetén az egyensúlyi állapot homogén, így a szabadenergiát $|\psi|$ -szerint minimalizálva kapjuk:

$$2\alpha|\psi_0| + 2\beta|\psi_0|^3 = 0,$$

azaz

$$|\psi_0|^2 = 0 \quad \text{vagy} \quad |\psi_0|^2 = -\frac{\alpha(T)}{\beta(T)} \quad (\text{I. 3})$$



1. ábra

A fázisátmenet jelenségének leírásához fizikailag azt várjuk, hogy a szabadenergia $|\psi|$ függvényében $T > T_c$ és $T < T_c$ -re az 1. ábrán látható módon viselkedik: $T > T_c$ -re, a normál fázisban, zérus kell legyen a legvalószínűbb ψ érték, míg $T < T_c$ -re a

szupravezető fázisban, a szabad energia minimumát egy véges ψ_0 értéknél várjuk. Így tehát a $|\psi_0|$ -ra nyert két megoldás közül $|\psi_0| = 0$ a $T > T_c$ esetnek felel meg, $|\psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$ pedig, a paraméterek következő, lehető legegyszerűbb, választása

mellett

$$\begin{aligned}\alpha &= -\alpha'_c t, & t &= \frac{T_c - T}{T_c} \\ \beta &= \beta_c = \text{konst} > 0 \\ \delta &= \delta_c = \text{konst} \left(\rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \right),\end{aligned}\tag{I. 4}$$

$T < T_c$ -re adja a probléma megoldását. $T < T_c$ -nél tehát az egyensúlyi szabadenergia (Ω a térfogatot jelöli)

$$F(\psi_0) = F_n - \frac{1}{2} \frac{\alpha'^2}{\beta} \Omega$$

melyből a hőmérséklet szerinti kétszeri deriválással megkapható az egységnyi térfogatra eső fajhő ugrása a kritikus pontnál

$$\Delta C = \frac{\alpha'^2}{\beta_c T_c}.\tag{I. 5}$$

Hasonlóképpen, a H_c kritikus mágneses tér értéke is kifejezhető az α'_c, β_c paraméterekkel. $H_c^2/8\pi$ az az energia, mely a szupravezető és normál állapotok közötti energiakülönbséget kompenzálja:

$$f_n - f_s = \frac{H_c^2}{8\pi} = -\alpha |\psi_0|^2 - \frac{\beta}{2} |\psi_0|^4 = \frac{1}{2} \frac{\alpha'^2}{\beta},\tag{I. 6}$$

ahol kihasználtuk (I. 3.)-at. (I. 6)-ból tehát

$$H_c = \sqrt{\frac{4\pi |\alpha'|^2}{\beta}} = \sqrt{\frac{4\pi \alpha'^2}{\beta_c}} t\tag{I. 7}$$

Mágneses tér jelenlétében a szabadenergiát ψ^* és az $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ vektor potenciál szerint minimalizálva a Ginzburg—Landau egyenletekhez jutunk.

$$\delta \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)^2 \psi(\mathbf{R}) - \frac{\partial f_s(\mathbf{R})}{\partial \psi^*} = 0,$$

vagy (I. 2) felhasználásával

$$\delta \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)^2 \psi(\mathbf{R}) + [\alpha'_c t - \beta_c |\psi|^2] \psi(\mathbf{R}) = 0\tag{I. 8}$$

és

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = \frac{i\pi e^*}{m\hbar c} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \mathbf{R}} \right] + \frac{4\pi e^{*2}}{2m\hbar^2 c^2} |\psi|^2 \mathbf{A}(\mathbf{R})$$

amiből

$$\mathbf{j} = \frac{ie^*}{4m\hbar} \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \mathbf{R}} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}} \right] - \frac{e^{*2}}{2m\hbar^2 c} |\psi|^2 \mathbf{A}.\tag{I. 9}$$

Megjegyezzük, hogy a variációs derivált képzése során kihasználtuk, hogy a határfelületen,

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) \psi = 0 \quad (\text{I. 8a})$$

Az (I. 8), (I. 9) differenciálegyenlet-rendszer megoldásával kapható meg $\psi(\mathbf{R})$ és $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ legvalószínűbb alakja.

Az elmélet két karakterisztikus hosszát tartalmaz: a ξ koherencia hosszát és a λ behatolási mélységet. ξ arra jellemző, hogy a rendparaméter hogyan módosul valamilyen lokális zavar hatására. Az (I. 8.) egyenletbe $A=0$ -t írva és valós rendparaméterre szorítkozva könnyen kapható az az eredmény, hogy a perturbáció exponenciálisan cseng le a

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{\delta}{2|\alpha|}} \quad (\text{I. 10})$$

karakterisztikus hosszal. (I. 4) felhasználásával adódik, hogy $\xi(T) \sim (T_c - T)^{-1/2}$, ha $T \lesssim T_c$; tehát a koherenciahossz végtelenhez tart a kritikus pontnál.

A behatolási mélység a mágneses térnek a szupravezető anyagba való behatolását jellemzi. Az (I. 9.) egyenletből a legegyszerűbb esetben, amikor féltérlet kitöltő idealizált szupravezető esetét tekintjük (2. ábra), a mágneses térerősségre a

$$H_x = H_x(0) e^{-\frac{z}{\lambda(T)}}$$

kifejezés adódik, ahol

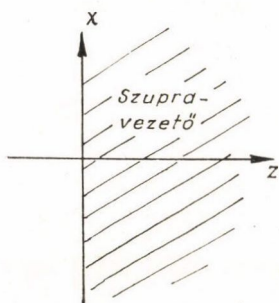
$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi e^{*2}} \frac{1}{|\psi_0|^2}} \sim \frac{1}{(T_c - T)^{1/2}}, \quad (\text{I. 11})$$

azaz a behatolási mélység is végtelenhez tart, ha $T \rightarrow T_c$, hasonlóan, mint $\xi(T)$. A két karakterisztikus hossz hányadosa az ún. Ginzburg—Landau paraméter:

$$\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} = \frac{mc}{e^* \hbar} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}}. \quad (\text{I. 12})$$

mely hőmérséklet független T_c közelében.

A szupravezetőket mágneses térben való viselkedésük szempontjából κ értéke alapján két nagy csoportba szokás osztani, $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ esetén beszélünk Pippard-féle



2. ábra

vagy I. típusú szupravezetőkről, melyeket reverzibilis mágneses és termodinamikai viselkedés jellemez (H_c -nél kisebb külső mágneses tér jelenléte esetén teljes Meissner effektus, stb.). A legtöbb tiszta szupravezető ebbe a csoportba tartozik ($\kappa_{Al} = 0,05 - 0,01$, $\kappa_{In} = 0,1$, $\kappa_{Sn} = 0,15$, $\kappa_{Pb} = 0,2 - 0,3$ stb.). A $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$

vel jellemzett szupravezetők a London-féle, lokális, vagy II. típusú szupravezetők. Jellemzőjük a nem tökéletes Meissner effektus, az alsó és felső kritikus mágneses terek megjelenése: a szupravezető mintába a térbehatolás egy alsó, H_{c1} kritikus térnél

kezdődik el és a teljes behatolás a felső H_{c_2} kritikus térnél valósul meg. A $H_{c_1} < H < H_{c_2}$ tartományban egy egyenletes eloszlású, áram-örvényekből álló struktúra alakul ki. Ezt az örvényképet a Ginzburg—Landau egyenletek megoldásával Abrikoszov alkotta meg [20].

Az örvény magjában az anyag normál állapotú. H_{c_1} az a tér, amelynél egy örvény keletkezése a szupravezető anyagban energetikailag kedvezővé válik, míg a H_{c_2} térnél az örvények olyan nagy sűrűsége alakult ki, hogy megindul a szomszédos örvények magjainak átfedése.

H_{c_2} számolása legegyszerűbben a Ginzburg—Landau egyenletek linearizált formája alapján történhet [21]. H_{c_2} -höz közel (I. 8) ($e^* = 2e$ -t írva) a

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_R - \frac{2ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)^2 \psi = \alpha \psi \quad (\text{I. 13})$$

alakra egyszerűsödik, ahol $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{H}$ és H helyett a külső térerősség írható be, ugyanis a szelfkonzisztens mágneses tér járuléka $|\psi|^2$ rendűek és így elhanyagolhatók ((I. 9) ψ -ben másodrendű). A linearizált egyenlet olyan megoldását keressük, amikor az egész anyag szupravezető (nemcsak a felülete). Az (I. 13) egyenlet formálisan megegyezik egy $2e$ töltésű, mágneses térbe helyezett részecske Schrödinger egyenletével. z irányú tér esetén a részecske z irányú v_z sebességgel mozog, az xy síkban körmozgást végezve

$$\omega_c = \frac{2eH}{mc}$$

körfrekvenciával. Az egyenlet kötött állapotú megoldásához tartozó saját-értékei

$$E_n = \frac{1}{2} m v_z^2 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad n \geq 0, \quad \text{egész.}$$

A legalacsonyabb nivó energiája, $n=0$ $v_z=0$ helyettesítéssel:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_c = \frac{e \hbar H}{mc},$$

amiből

$$\alpha = -\frac{\hbar e H}{mc}.$$

Ennek megoldása H -ra adja a felső mágneses teret H_{c_2} -t

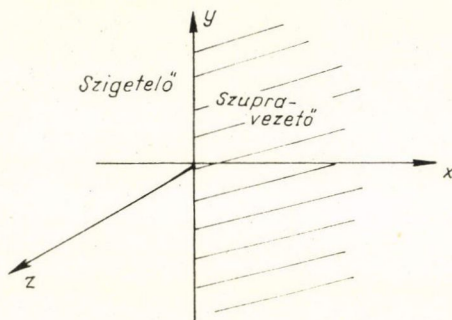
$$H_{c_2} = -\frac{\alpha mc}{e \hbar} \quad (\text{I. 14})$$

mely az α paramétert tartalmazza, akár csak ξ ; a hőmérsékletfüggése is, természetesen, ξ hőmérsékletfüggését követi. H_{c_2} az a legnagyobb H érték, amire még van szupravezető típusú megoldás. $n \neq 0$, $v_z = 0$ esetén $2e \hbar H / mc = -\alpha / \left(n + \frac{1}{2} \right)$ és az ebből adódó tér $H < H_{c_2}$; hasonló a helyzet, ha $v_z \neq 0$.

(I. 7)-et és (I. 12)-t felhasználva kapjuk (I. 14)-ből, hogy

$$H_{c_2} = \sqrt{2} \kappa H_c \quad (\text{I. 15})$$

Ha $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$, $H_{c_2} > H_c$ és így $H_c < H < H_{c_2}$ -re is szupravezető az anyag, nem teljes a Meissner effektus, amint azt a II. típusú szupravezetőkéről állítottuk. Ha $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ akkor $H_{c_2} < H_c$. $H_{c_2} < H < H_c$ esetén metastabil állapot alakulhat ki. H_{c_2} -t ilyenkor túlhűtési kritikus mágneses térnek nevezzük.



3. ábra

Saint James és de Gennes [22] 1963-ban kimutatták, hogy a szupravezető struktúra, a nukleáció kialakulása a minta felületén kezdődik meg. Létezik egy H_{c_3} kritikus mágneses tér, mely H_{c_2} -nél nagyobb és a $H_{c_2} < H < H_{c_3}$ tartományban a minta belseje már nem, de egy felületi rétege még szupravezető állapotban van. Ezen probléma vizsgálatában az (I. 8a) határfeltételnek igen lényeges szerepe van. A felületre merőleges külső mágneses tér esetén az effektus nem lép fel, ezért tegyük fel, hogy \mathbf{H} z irányú, a szupravezető határfelülete az yz sík és a szupravezető az

$x > 0$ tartományt foglalja el. (3. ábra). $A_z = A_x = 0$, $A_y = Hx$ mérték választás mellett Saint James és de Gennes a

$$\psi = e^{iky} f(x) \quad (\text{I. 16})$$

alakban keresték a linearizált (I. 13) Ginzburg—Landau egyenlet megoldását. (I. 16)-ot (I. 13)-ba behelyettesítve a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\hbar k - \frac{2eHx}{c} \right)^2 f = -\alpha f \quad (\text{I. 17})$$

egyenlet adódik. Ehhez járul a

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (\text{I. 18})$$

határfeltétel. (I. 17) olyan mint egy $x_0 = \frac{\hbar kc}{2eH}$ egyensúlyi helyzetű harmonikus oszcillátor Schrödinger egyenlete. A szerzők a határfeltételt oly módon vették figyelembe, hogy (I. 17)-et egy módosított, az egész $-\infty < x < \infty$ tartományban érvényes

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 f}{dx^2} + V(x)f = -\alpha f \quad (\text{I. 19})$$

egyenlettel helyettesítették, ahol

$$V(x) = \begin{cases} \frac{2e^2 H^2}{mc^2} (x-x_0)^2 & x > 0 \\ V(-x) & x < 0 \end{cases}$$

A megoldás, mely a legalacsonyabb sajátértékhez tartozik, (I. 18)-at automatikusan kielégíti, maga a sajátérték pedig kisebb, mint a „bulk” probléma esetében, ami azt mutatja, hogy a felületi nukleáció energetikailag előnyös. Részletes számolás eredménye az, hogy x_0 optimális értéke $0,59 \zeta(T)$, a megfelelő sajátérték:

$$-\alpha = 0,59 \frac{ehH_{c3}}{mc}$$

azaz, (I. 7) és (I. 12) felhasználásával,

$$H_{c3} = 2,4 \kappa H_c \quad (\text{I. 20})$$

és (I. 14)-gyel összevetve:

$$H_{c3} = 1,7 H_{c2}. \quad (\text{I. 21})$$

Hangsúlyozzuk, hogy az (I. 21) eredmény szempontjából az elmélet α, κ paramétereinek konkrét értékei lényegtelenek, csak a Ginzburg—Landau egyenlet *alakja* és a *határfeltétel* lényegesek.

(I. 20), (I. 21) és (I. 15)-ből látható, hogy II. típusú szupravezetőknel $H_c < H_{c2} < H_{c3}$, míg I-es típusú szupravezetőknel $0,42 < \kappa < 1/\sqrt{2}$ esetén $H_{c2} < H_c < H_{c3}$, ha pedig $\kappa < 0,42$, akkor $H_{c3} < H_c$. Az utolsó esetben a felületi szupravezető állapot termodinamikai egyensúlyban nem létezhet, túlhűtéssel azonban H_{c3} mégis észlelhető volt.

A Ginzburg—Landau egyenlet az eddig bemutatott formájában izotróp vagy köbös anyagra érvényes. Az általánosítás anizotróp esetre Ginzburgtól [15] származik. A szabadenergia ekkor a következő alakú:

$$F = \int d\mathbf{R} \left[f_s(\mathbf{R}) + \delta_{\mu\nu} \left(\nabla_{\mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)_{\mu} \psi \cdot \left(\nabla_{\mathbf{R}} + \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)_{\nu} \psi^* + \frac{H^2}{8\pi} \right], \quad (\text{I. 22})$$

ahol $\delta_{\mu\nu}$ az izotróp eset δ konstansa helyett fellépő tenzor. (I. 22)-ben az azonos indexekre összegzés van. Az izotróp eset $\delta = \frac{\hbar^2}{2m}$ választása helyett most $\delta_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m_{\mu\nu}}$ írható, ahol $m_{\mu\nu}$ tömegtenzor. A szabadenergiát, hasonlóan mint az izotróp esetben, minimalizálva kapjuk az ún. Ginzburg-egyenleteket:

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\mu\nu}} \left(\nabla_{\mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right)_{\mu} \left(\nabla_{\mathbf{R}} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right)_{\nu} \psi(\mathbf{R}) + \left[\alpha'_c \frac{T_c - T}{T_c} - \beta_c |\psi|^2 \right] \psi = 0 \quad (\text{I. 23})$$

$$j_{\mu}(\mathbf{R}) = \frac{ie^*}{4m_{\mu\nu}} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial R_{\nu}} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial R_{\nu}} \right) - \frac{2e^{*2}}{m_{\mu\nu} c} |\psi|^2 A_{\nu}. \quad (\text{I. 24})$$

II. A mikroszkopikus elmélet gyenge csatolású, izotróp szupravezetőkre

II. 1. A Ginzburg—Landau egyenletek Gorkov-féle származtatása.

Az elmélet érvényességének feltételei

A Ginzburg—Landau elmélet [1] mikroszkopikus megalapozására csak 8 évvel az elmélet felállítása után került sor a Bardeen, Cooper, Schrieffer [2] elmélet alapján. Gorkov [3], Green függvényes technikát használva megmutatta, hogy a mikroszkopikus elmélet egyenleteiből az (I. 8), (I. 9) egyenletek leszámaztathatók és a paraméterek kiszámítására összefüggéseket nyert. Ebben a pontban röviden ismertetjük a Gorkov-féle levezetés gondolatmenetét és eredményeit. E célból vezessük be a G és F termodinamikai Green-függvényeket a

$$G(\mathbf{r}_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \tau_2) = - \langle T_\tau (\psi_\dagger(\mathbf{r}_1, \tau_1) \psi_\dagger^+(\mathbf{r}_2, \tau_2)) \rangle$$

$$F^+(\mathbf{r}_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \tau_2) = \langle T_\tau (\psi_\dagger^+(\mathbf{r}_1, \tau_1) \psi_\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_2)) \rangle$$

definícióval, ahol $\psi_\dagger^+(\mathbf{r}, \tau)$ és $\psi_\dagger(\mathbf{r}, \tau)$ Heisenberg-képbeli részecske keltő és eltüntető operátorok. Az F Green-függvény zérustól különböző volta a szupravezető állapot jellegzetessége és kifejezi mikroszkopikusan sok elektronpár kondenzálódását egy állapotba. τ_1, τ_2 imaginárius idő-változók, melyek 0 és $1/T$ között változhatnak és a T_τ operátor a mögötte szereplő operátorokat a τ változó növekedésének sorrendjében rendezi el.

Az átlagolás Gibbs-féle statisztikus átlagot jelent. Áttérve a $G(\mathbf{r}_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \tau_2)$ és $F^+(\mathbf{r}_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \tau_2)$ Green függvények Fourier transzformáltjaira a $\tau = \tau_1 - \tau_2$ változó szerint a

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{\omega_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} F_{\omega_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

$$\omega_n = (2n+1)\pi k_B T, \quad n = \text{egész}$$

összefüggések segítségével, Gorkov a G_ω és F_ω^* függvényekre vonatkozó

$$\left[i\omega + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \mu \right] G_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \Delta(\mathbf{r}) F_\omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{II. 1.1})$$

$$\left[-i\omega + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \mu \right] F_\omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Delta^*(\mathbf{r}) G_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{II. 1.2})$$

egyenletekből indult ki.**

A (II. 1.1) és (II. 1.2) egyenletekben szereplő $\Delta(\mathbf{r})$ függvényt a következő egyenlet definiálja

$$\Delta(\mathbf{r}) = VT \sum_\omega F_\omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}). \quad (\text{II. 1.3})$$

* A továbbiakban G_ω -t írunk G_{ω_n} és \sum_ω -t \sum_{ω_n} helyett, az egyszerűség kedvéért.

** Itt és a továbbiakban is $\hbar = 1$.

$\Delta(\mathbf{r})$ térmentes ($H=0$) esetben az energiagappal egyezik meg, V a BCS kölcsönhatás [2] Gorkov-féle alakjában,

$$H_{\text{int}} = \frac{V}{2} \int \psi_{\beta}^{+}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \text{-ban} \quad (\text{II. 1.4})$$

szereplő csatolási állandó.

Gorkov bevezeti a normál állapotot külső tér jelenléte esetén leíró $\tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ Green függvényt is, amely az

$$\left[i\omega + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \mu \right] \tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{II. 1.5})$$

egyenletnek tesz eleget. \tilde{G}_{ω} segítségével G_{ω} és F_{ω}^{+} a következő módon fejezhető ki:

$$G_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \int \tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \Delta(\mathbf{r}'') F_{\omega}^{+}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') d\mathbf{r}''$$

$$F_{\omega}^{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}'') G_{\omega}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') d\mathbf{r}''$$

Gorkov ezen egyenleteket használja G_{ω} és F_{ω}^{+} közelítő meghatározására, azon fizikai körülmények következményeit figyelembe véve, hogy az elméletben érdekes távolságok sokkal nagyobbak az atomi távolságnál és hogy $T \simeq T_c$.

Az első körülmény miatt \tilde{G}_{ω} kváziklasszikus közelítésben számítható, azaz

$$\tilde{G}_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}, \quad (\text{II. 1.6})$$

ahol

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r})(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

és $G_{\omega}^{(0)}$ a normál állapotú Green függvény $H=0$ esetén:

$$G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \begin{cases} \frac{m}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ip_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\frac{|\omega_n| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{v_F}}, & \omega > 0 \\ -\frac{m}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-ip_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\frac{|\omega_n| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{v_F}}, & \omega < 0 \end{cases} \quad (\text{II. 1.7})$$

Az $e^{-\frac{|\omega_n| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{v_F}} \equiv e^{-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{r_{on}}}$ exponenciális szorzófaktor miatt $G_{\omega}^{(0)}$ az $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0$

pont környezetében lokalizált, az $r_{on} = \frac{v_F}{(2n+1)\pi k_B T_c} = \frac{1,76}{2n+1} \xi_0$ karakteris-

tikus távolságon csökken e -edrészére. Itt $\xi_0 = \frac{v_F}{1,76\pi k_B T_c}$ a Pippard—BCS-féle koherenciahossz, mely a pár kiterjedését jellemzi zérus hőmérsékleten. ω -ra (II. 1.3), (II. 1.8)-ben összegzés van. Ebbe az összegbe az $n=0$ körüli tagok adják a leglényegesebb járulékot, mert az exponenciális levágása ezekre a legenyhébb. $n=0$ esetén $r_{00} = 1,76\xi_0$, aminek alapján érthető, hogy az elméletben szereplő karakterisztikus hossz éppen ξ_0 ; a lassan változó mennyiségekkel kapcsolatban a lassú változás

jellemzésére éppen ξ_0 -t fogjuk használni. Az, hogy a kritikus hőmérséklet körüli hőmérséklet-tartományra szorítkozunk, a következő feltevéseket teszi jogosulttá:

1. $T \lesssim T_c$ -nél $\Delta(r, T)$ kicsi $k_B T_c$ -hez képest, és így jó kifejtési paraméter. Indokolás: $T=0$ -nál $\Delta = 1,76 k_B T_c$, T növelésével Δ csökken és $\Delta(T_c) = 0$.

2. $T \lesssim T_c$ -re mind $\Delta(\mathbf{r})$ mind $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ lassan változnak a ξ_0 koherencia hosszban belül. Indokolás: mint az I. fejezetben láttuk, $\Delta(\mathbf{r})$ (azaz $\psi(\mathbf{r})$, mint kiderül) térbeli változását $\xi(T)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ -ét $\lambda(T)$ szabja meg és ezek mindketten végtelenhez tartanak, ha $T \rightarrow T_c$ és így elég közel T_c -hez a lassú változás feltétele biztosan teljesül. A $\xi(T) \gg \xi_0$ feltétel teljesülése csak $(T_c - T)/T_c$ 1-hez képest való kicsiségétől függ;

míg a $\lambda(T) \gg \xi_0$ feltétel így írható $\left(\xi(T) = 0,74 \xi_0 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1/2} \right)$

$$\lambda(T) \gg \xi(T) \frac{1}{0,74} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2}$$

azaz

$$\kappa \gg \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2} \frac{1}{0,74}.$$

Vagyis $\kappa^2 \gg \frac{\Delta T}{T_c}$ a Ginzburg—Landau elmélet érvényességének egyik feltétele. Nb esetén, melyre $\kappa = 1,1$, ez a feltétel az egész hőmérséklettartományban teljesül, míg Pb-re, melyre $\kappa \approx 0,3$ csak T_c -hez igen közel.

3. Minthogy $T \rightarrow T_c$ -re a kritikus mágneses tér zérushoz tart, a mágneses tér nagysága is kicsinek tekinthető. Pontosabban az

$$\frac{e}{c} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \xi_0 \approx \frac{e}{c} |H| \xi_0^2 \ll 1$$

feltételnek kell teljesülnie.

Ilyen értelemben fogjuk $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ -t is kis paraméternek tekinteni.

A feltevéseknek megfelelő sorfejtések elvégzése után Gorkov közelítő kifejezéseket nyer F_ω^+ és G_ω -ra, amelyeket behelyettesít a (II. 1.3) gap-egyenletbe, illetve az áram

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{ie}{m} (\nabla_{\mathbf{r}'} - \nabla_{\mathbf{r}})_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} T \sum_{\omega} G_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{2e^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} T \sum_{\omega} G_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

kifejezésébe. Ily módon a Ginzburg—Landau egyenleteket kapja vissza, melyekben szereplő rendparaméter a $\Delta(\mathbf{r})$ gap-függvénnyel arányos:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{7\zeta(3)N}{8(\pi k_B T_c)^2}} \Delta(\mathbf{r}) \approx \frac{\sqrt{N}}{4,5 k_B T_c} \Delta(\mathbf{r})$$

ahol $\zeta(x)$ a Riemann-féle ζ függvény és N a teljes elektronsűrűség. Továbbá azt találja, hogy $e^* = 2e$, ami teljes összhangban áll a szupravezetés párkonceptiójával. Az elméletben szereplő egyéb paraméterek értékei a következők:

$$\alpha'_c = \frac{2}{\eta}, \quad \beta_c = \frac{4}{\eta N}; \quad \eta = \frac{7\zeta(3)\varepsilon_F}{6(\pi k_B T_c)^2} = 0,13 \frac{\varepsilon_F}{(k_B T_c)^2} \quad (\text{II. 1.9})$$

Ezekből kiszámolva a karakterisztikus hosszokat, a következő kifejezések adódnak:

$$\xi = 0,74 \xi_0 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1/2}; \quad \xi_0 = 0,18 \frac{v_F}{k_B T_c}$$

és

$$\lambda(T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda_L(0) \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1/2}, \quad \lambda_L(0) = \sqrt{\frac{mc^2}{Ne^2 4\pi}}$$

*

II. 2. Általánosított Ginzburg—Landau egyenletek származtatása

Az utóbbi években többek között Werthamer [4] és Zumino és Uhlenbrock [5] származtattak le olyan általánosított Ginzburg—Landau egyenleteket, amelyek levezetésénél nem tételezték fel a gap függvény abszolút értékének kicsiny voltát, tehát egyenleteik T_c -nél lényegesen kisebb hőmérsékletre is érvényesek lehetnek. A II. 1. pontban vázolt többi feltevés (2) és (3.) megtartása viszont lokális szupravezetőkre korlátozza az általuk nyert egyenletek érvényességét, mert míg ezek a feltevések T_c -hez elég közel minden szupravezetőre teljesülnek, T_c -től távolabb csak II. típusú szupravezetőkre maradnak érvényesek.

Az alábbiakban Werthamer eredményeit származtatjuk le röviden, a Werthamer-féle eljárást kissé módosított formában prezentálva, ami egyrészt egyszerűbb, másrészt pedig alkalmas a későbbiekben (III. IV. fejezetek) sorakerülő problémák tárgyalásához szükséges általánosításra. A levezetés minden lépésben való mérték-invarianciájának biztosítására Zumino és Uhlenbrock [5] módszerét követjük.

A kiindulásul szolgáló egyenletek a Gorkov-féle (II. 1.1), (II. 1.2) egyenletek. Ezeket az ún. kevert reprezentációba transzformáljuk, azaz Fourier transzformációt hajtunk végre a különbségi koordinátában, így pl.:

$$G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \int d^3(r_1 - r_2) e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} G_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

ahol $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Az (II. 1.1), (II. 1.2) egyenletek kevert reprezentációban a következő alakot öltik:

$$i\omega G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = 1 - \theta \left[\Delta(\mathbf{R}) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] \quad (\text{II. 2.1})$$

$$-i\omega F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = \theta [\Delta^*(\mathbf{R}) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R})] \quad (\text{II. 2.2})$$

ahol $\varepsilon(p)$ normál állapotú részecske energiát jelöl és θ végtelenrendű differenciál-operátor [23]

$$\begin{aligned} \theta[a(\mathbf{p}, \mathbf{R})b(\mathbf{p}, \mathbf{R})] &\equiv \\ &\equiv \lim_{\substack{\mathbf{R}' \rightarrow \mathbf{R} \\ \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}}} \exp \left[\frac{i}{2} \sum_{xyz} \left(\frac{\partial}{\partial R_x} \frac{\partial}{\partial p'_x} - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial}{\partial R'_x} \right) \right] a(\mathbf{p}, \mathbf{R}) b(\mathbf{p}', \mathbf{R}'), \end{aligned} \quad (\text{II. 2.3})$$

Itt a és b tetszőleges függvények és az xyz -re való összegzés azt jelöli, hogy x , y és z ciklikusan cserélendők.

A II. 1. pontban tárgyalt 2. és 3. feltevések szerint $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ kicsi és lassan változik. A mértékinvariancia minden lépésben való biztosítására Zumino és Uhlenbrock nyomán bevezetjük a kis σ paramétert az

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = \sigma \bar{\mathbf{A}}(\sigma \mathbf{R})$$

definícióval és azt használjuk kifejtési paraméterként. Ily módon ∇_R és A -szerinti szimultán sorfejtést végzünk el, ami egy mértékinvariáns mennyiség tetszőleges rendig való sorfejtésnél biztosítja a közelítő kifejezés mértékinvarianciáját. Továbbá bevezetjük, hasonló célból, a

$$\bar{G}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp \left[\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{II. 2.4})$$

$$\bar{F}_\omega^+ = F_\omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp \left[-\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{II. 2.5})$$

és

$$\bar{\Delta}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp \left[-\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{II. 2.6})$$

függvényeket is, melyek közül $\bar{G}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ mértékinvariáns, \bar{F}_ω^+ pedig az

$$\bar{F}_\omega^+ \rightarrow \bar{F}_\omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-\frac{2ie}{c} \Phi(\mathbf{R})}$$

módon transzformálódik ($\bar{\Delta}^*$ hasonlóan) az $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \text{grad } \Phi$, $\psi \rightarrow \psi e^{\frac{ie}{c} \Phi}$ mértéktranszformációnál. Integrációs útként (II. 2.4)–(II. 2.6)-ban a végpontokat összekötő egyenest választjuk. A Ginzburg–Landau egyenletek Werthamer-féle általánosításának levezetéséhez \bar{F}_ω^+ -t, \bar{G}_ω -t σ -ban másodrendig szükséges kifejteni. Mint-hogy a kiinduló egyenletek F_ω^+ -re és G_ω -ra vonatkoznak, egyszerűbb lesz először azokat számítani σ -ban másodrendig és azután a (II. 2.4), (II. 2.5) formulákból vegyes reprezentációban σ -ban másodrendig kapható [5]

$$\bar{G}_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \left(1 + \frac{e}{c} (\mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2c^2} (\mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{p})^2 \right) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \quad (\text{II. 2.7})$$

$$\bar{F}_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \left(1 - \frac{ie}{4c} \frac{\partial A_\lambda}{\partial R_\sigma} \frac{\partial}{\partial p_\lambda} \frac{\partial}{\partial p_\sigma} \right) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \quad (\text{II. 2.8})$$

összefüggéseket felhasználva számítani \bar{G}_ω -t és \bar{F}_ω^+ -et.

Az eljárás menete a következő. A (II. 2.1), (II. 2.2) — egyenletekben szereplő mennyiségek mindegyikét kifejtjük σ -szerint:

$$\begin{aligned} G_\omega &= G_\omega^{(0)} + G_\omega^{(1)} + G_\omega^{(2)} + \dots \\ F_\omega^+ &= F_\omega^{+(0)} + F_\omega^{+(1)} + F_\omega^{+(2)} + \dots \\ \varepsilon &= \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} \\ \theta &= \theta^{(0)} + \theta^{(1)} + \theta^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

ahol

$$\theta^{(0)} = 1; \quad \theta^{(1)} = \lim_{\substack{\mathbf{R}' \rightarrow \mathbf{R} \\ \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}}} \left(\frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}'} \right)$$

$$\theta^{(2)} = -\frac{1}{8} \lim_{\substack{\mathbf{R}' \rightarrow \mathbf{R} \\ \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}'} \right)^2,$$

és az egyforma rendű tagokat egyenlővé tesszük egymással. Így $G_{\omega}^{(0)}$, $G_{\omega}^{(1)}$ stb.-re egyenletek adódnak. Ezután \bar{G}_{ω} és \bar{F}_{ω}^{+} -re áttérve kapjuk

$$\left(\mathbf{O}_{\mathbf{R}} \equiv \mathbf{V}_{\mathbf{R}} - \frac{2ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)$$

$$\bar{F}^{+(0)} = \frac{\bar{\Delta}^*}{\omega^2 + E^2}; \quad E^2 = \varepsilon^2 + |\bar{\Delta}|^2$$

$$\bar{F}^{+(1)} = \frac{\varepsilon}{m} \frac{\mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^*}{[\]^2}, \quad [\] \equiv \omega^2 + E^2$$

$$\begin{aligned} \bar{F}^{+(2)} = & \frac{\varepsilon}{4m} \frac{\mathbf{O}_{\mathbf{R}}^{*2} \bar{\Delta}^*}{[\]^2} - \frac{\varepsilon}{2m} \frac{\bar{\Delta}^* \nabla_{\mathbf{R}}^2 |\bar{\Delta}|^2}{[\]^3} + \frac{\varepsilon}{2m} \frac{\bar{\Delta}^* (\nabla_{\mathbf{R}} |\bar{\Delta}|^2)^2}{[\]^4} + \\ & + \frac{1}{4m^2} \left(\mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \right)^2 \bar{\Delta}^* \left[\frac{2}{[\]^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \frac{1}{[\]} \right] - \frac{1}{m^2} \frac{\bar{\Delta} [\mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^*]^2}{[\]^3} + \\ & + \frac{1}{2m^2} \frac{\bar{\Delta}^* (\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{R}} |\bar{\Delta}|^2)^2}{[\]^4} - \frac{1}{3m^2} \bar{\Delta}^* (\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{R}})^2 |\bar{\Delta}|^2 \left[\frac{1}{[\]^3} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon}{[\]^3} \right] \end{aligned}$$

$$G_{\omega}^{(0)} = -\frac{i\omega + \varepsilon}{\omega^2 + E^2}$$

$$G_{\omega}^{(1)} = -\frac{i}{2m} \frac{1}{[\]^2} [\bar{\Delta}^* \mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}} \bar{\Delta} - \bar{\Delta} \mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^*]$$

$$\begin{aligned} G_{\omega}^{(2)} = & -\frac{1}{8m} \frac{\nabla_{\mathbf{R}}^2 |\bar{\Delta}|^2}{[\]^2} \left(1 - \frac{4\varepsilon(i\omega + \varepsilon)}{[\]} \right) + \frac{1}{4m} \frac{(\nabla_{\mathbf{R}} |\bar{\Delta}|^2)^2}{[\]^3} \left(1 - \frac{2\varepsilon i\omega + \varepsilon}{[\]} \right) - \\ & - \frac{1}{2m} \frac{\mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^* \mathbf{O}_{\mathbf{R}} \bar{\Delta}}{[\]^2} + \frac{1}{4m^2} \frac{[\mathbf{p} (\bar{\Delta}^* \mathbf{O}_{\mathbf{R}} \bar{\Delta} - \bar{\Delta} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^*)]^2}{[\]^3 (i\omega + \varepsilon)} + \\ & + \frac{1}{2m^2} (\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{R}})^2 |\bar{\Delta}|^2 \frac{i\omega + \varepsilon}{[\]^3} \left(1 - \frac{2\varepsilon^2}{[\]} \right) - \frac{1}{4m^2} \frac{(\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{R}} |\bar{\Delta}|^2)^2}{[\]^3 (i\omega + \varepsilon)} \left(1 + \frac{2(i\omega + \varepsilon)^3}{[\]} \right) + \\ & + \frac{1}{m^2} \frac{(\mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}}^* \bar{\Delta}^*) (\mathbf{p} \mathbf{O}_{\mathbf{R}} \bar{\Delta})}{(i\omega + \varepsilon) [\]^2} \end{aligned}$$

A kapott kifejezéseket behelyettesítjük a

$$\bar{\Delta}^*(\mathbf{R}) = VT \sum_{\omega} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \bar{F}_{\omega}^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \quad (\text{II. 2.9})$$

és

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}) = \frac{2e}{m} T \sum_{\omega} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \mathbf{p} \bar{G}_{\omega}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \quad (\text{II. 2.10})$$

képletekbe, melyek (II. 1.3) és (II. 1.8) kevert reprezentációbeli alakjai. A (II. 2.9) egyenlethez $\bar{F}_{\omega}^{+(1)}$ nem ad járulékot, mert ω -ban páratlan lévén összegzésnél zérus eredményt kapunk. Továbbá nem ad járulékot $\bar{F}_{\omega}^{+(2)}$ első három tagja sem, mert ezek ε -ban páratlanok és a $|\mathbf{p}|$ szerinti integrál átírható $-\omega_D$ -tól $+\omega_D$ -ig terjedő ε -szerinti integrállá a szokásos módon. Hasonlóan $\bar{F}_{\omega}^{+(2)}$ -ből az ε -szerinti deriváltakat tartalmazó tagok is zérus eredményre vezetnek. Ami az áramot illeti, \bar{G}_{ω} -ból csak a \mathbf{p} -ben páratlan tagok jönnek számításba, azaz $\bar{G}_{\omega}^{(1)}$. Ily módon a következő végeredményhez jutunk ($E^2 = \varepsilon^2 + |\Delta|^2$)

$$\begin{aligned} \Delta^*(\mathbf{R}) = VT \sum_{\omega} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\Delta^*}{[\omega^2 + E^2]} + \left[(\mathbf{O}_R^{*2} \Delta^* + \Delta (\mathbf{O}_R \Delta)^2) \frac{\partial}{\partial |\Delta|^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\Delta^*}{3} \frac{\partial^2 |\Delta|^2}{\partial \mathbf{R}^2} \frac{\partial}{\partial |\Delta|^2} + \frac{\Delta^*}{6} \left(\frac{\partial |\Delta|^2}{\partial \mathbf{R}} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial (|\Delta|^2)^2} \right] \frac{p^2/6m^2}{[\omega^2 + E^2]^2} \right\} \quad (\text{II. 2.11}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{R}) = \frac{2e}{m} \left[-\frac{i}{2} \left(\Delta^* \frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial \Delta^*}{\partial \mathbf{R}} \Delta \right) - \right. \\ \left. - \frac{2e}{c} |\Delta|^2 \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right] T \sum_{\omega} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{p^2/3m}{[\omega^2 + E^2]^2} \quad (\text{II. 2.12}) \end{aligned}$$

melyek éppen Werthamer egyenletei.

A (II. 2.11), (II. 2.12) egyenletek $T \lesssim T_c$ -nél átmennek a Ginzburg—Landau egyenletekbe a Gorkov-féle paraméterértékekkel [3] $A=0$ esetén pedig a BCS-féle gap egyenlet [2] kapható (II. 2.11)-ből.

Meg kell jegyeznünk, hogy a Werthamer egyenleteket (az általános esetben) mind ez ideig nem oldották meg.

*

III. Erős csatolású Ginzburg—Landau egyenletek

III. 1. Erős csatolású szupravezetők egyenletei mágneses tér jelenléte esetén

Legtöbb szupravezető esetében az elektron-fonon kölcsönhatásából adódó effektív elektron-elektron kölcsönhatás csatolási állandója $g'^2 (= \frac{2g^2 N(0)}{\omega_0})$, ahol g a konstansnak feltételezett elektron-fonon matrixelem, $N(0)$ az elektronok

állapotsűrűsége a Fermi nívón és ω_0 tipikus fonon frekvencia) körülbelül $\frac{1}{4}$, aminek következtében a mérhető fizikai mennyiségek nem érzékenyek az effektív, fonon-kicszerélődés által közvetített, elektron-elektron kölcsönhatás részleteire és ezért a BCS elmélet [2] kielégítően írja le a fizikai jelenségeket. Es vonatkozik az ún. gyenge csatolású szupravezetőkre.

Van azonban néhány fém: Pb, Hg stb., melyekre $g'^2 \cong 1$. Ezek esetében a BCS elmélet már nem alkalmazható, mivel a kiindulásul szolgáló kvázirészecske kép nem érvényes a következő ok miatt. [24] Ismeretes, hogy a kvázirész kép mindaddig érvényes, amíg az elektronállapotok Γ_k szélességére fennáll, hogy $\Gamma_k \ll E_k$ (E_k az elektronállapotok energiája). Szupravezetők esetében a domináns bomlási folyamat a fonon-emisszió, amelyet $E_k \cong \omega_D$ energia esetén (ω_D a Debye energia) $\Gamma_k \cong g'^2 \cdot \omega_D$ nagyságú vonalszélesség jellemez. Az $E_k = \omega_D$ körüli energia tartomány a virtuálisan gerjesztett állapotokon keresztül igen lényeges járulékot ad a szupravezető állapot energiájához. Ezen állapotokra tehát $\Gamma_k/E_k \cong 1$ és a kvázirész kép, mint állítottuk, nem alkalmazható.

A BCS elmélet általánosítását erős csatolású szupravezetők viselkedésének leírására mágneses tér nélküli, tehát térben homogén, esetre zérus hőmérsékleten Eliashberg [25] dolgozta ki 1960-ban. Az elméletet Schrieffer, Scalapino, Wilkins, Wada és Swihart [11], [26], [27], [28] továbbfejlesztették és sikeresen alkalmazták különféle anomális kísérleti eredmények interpretálására: így pl. magyarázni tudták szupravezető diódák áram—feszültség karakterisztikájának erős struktúráját, fájhó anomáliákat. Az elmélet lényege az, hogy a közvetlen elektron-elektron kölcsönhatás feltételezése helyett a csatolt elektron-fonon rendszer egyenleteiből kell kiindulni. Véges hőmérsékleti Green-függvény formalizmus továbbra is használható, csak hogy retardációs effektusok és olyan komplex sajátenergiák lépnek fel, melyekben az imaginárius és reális rész egyenlő szerepet játszik.

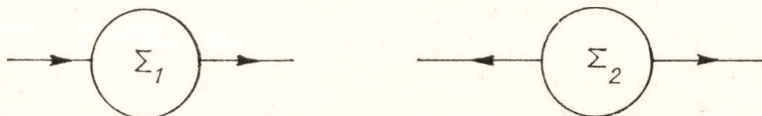
A mi célunk erős csatolású szupravezetők mágneses térbeli viselkedésének vizsgálata [12].

A II. fejezetben idézett [3], [4], [5] és más, a Ginzburg—Landau elmélet általánosítását célzó elméletek [6], [7], [8] mind gyenge csatolású elméletek, azaz lényegében a BCS elméleten alapulnak és így nem alkalmazhatók erős csatolású szupravezetők esetében. A fentiek alapján a következő, általánosabb problémát kell tehát megoldanunk: a $\Delta(\mathbf{R})$ gapfüggvényre vonatkozó egyenlet helyett a $\Sigma_2(\omega, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{R})$ „off-diagonal” sajátenergiát meghatározó egyenletet kell levezetnünk a $\Sigma_1(\omega, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{R})$ diagonális saját energiát megadó egyenlettel együtt. Kiindulásul a hőmérsékleti Green függvényekre vonatkozó

$$\left[i\omega - \xi \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \right) + \mu_0 \right] G_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \\ - \int \Sigma_2(i\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) F_\omega^+(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 + \int \Sigma_1(i\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) G_\omega(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 \quad (\text{III. 1.1})$$

$$\left[-i\omega - \xi \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \right) + \mu_0 \right] F_\omega^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ = \Sigma_1(-i\omega, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1) F_\omega^+(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 + \Sigma_2(i\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) G_\omega(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 \quad (\text{III. 1.2})$$

egyenleteket használjuk, ahol $\xi(\)$ a Bloch elektronok energia-operátora koordináta reprezentációban, Σ_1 ill., Σ_2 -t pedig mindazon irreducibilis sajátenergia-gráfok járulékeinak összege adja, melyek egy befutó és egy kifutó, illetve két kifutó külső vonalhoz csatlakoznak a 4. ábrán látható módon.*



4. ábra

A (III. 1.1.), (III. 1.2.) egyenletek így módon teljesen általánosak. A (II. 1.1.), (II. 1.2.) Gorkov-egyenletek abban a speciális esetben kaphatók vissza, ha a Σ_1 , Σ_2 sajátenergiás részek frekvenciafüggését elhanyagoljuk, $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Delta(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ -t írunk, Σ_1 -et a normál állapotra számolva az egyrészecske energia renormálása révén vesszük figyelembe és az egyrészecske energiák effektív tömeges közelítését tételezzük fel.

Kevert reprezentációba áttérve, (III. 1.1.) és (III. 1.2.) a következő alakot ölti:

$$i\omega G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = 1 - \theta [\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R})] + \theta [\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R})] \quad (\text{III. 1.3})$$

$$-i\omega F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = \theta [\Sigma_2^*(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) G_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R})] + \theta [\Sigma_1(-i\omega, -\mathbf{p}, \mathbf{R}) F_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R})] \quad (\text{III. 1.4})$$

Itt $\varepsilon(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p}) - \mu_0$ az elektronok Bloch-energiája a μ_0 kémiai potenciáltól mérve és θ a (II. 2.3.) képlettel megadott végtelen rendű differenciáloperátor. A Σ_1 és Σ_2 sajátenergiák meghatározására olyan közelítést használunk, mely az elektron-fonon kölcsönhatást $\sqrt{m/M}$ (m = elektrontömeg, M = iontömeg) pontosságig veszi figyelembe [30], [25]:

$$\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') G_\omega(\mathbf{p}', \mathbf{R}) \quad (\text{III. 1.5})$$

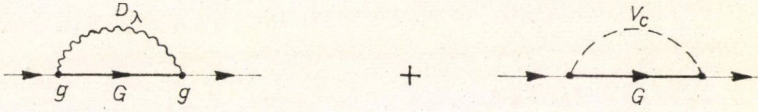
$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') F_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{R}) \quad (\text{III. 1.6})$$

ahol

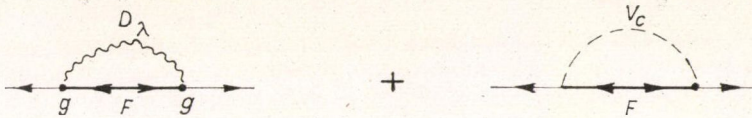
$$V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \equiv \sum_{\lambda} g_{\mathbf{p}-\mathbf{p}', \lambda}^2 D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}') + V_c(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \quad (\text{III. 1.7})$$

* A kvázirészecske sajátenergiája a szupravezető állapotban Σ_1 és Σ_2 -ből épül fel. Erre a kapcsolatra a továbbiakban nem lesz szükségünk, részletes analízise a szerző [29] cikkében található meg.

A (III. 1. 5.) egyenlet a következő sajátenergiás gráfok járulékaik figyelembevételének felel meg,



míg a (III. 1. 6.) egyenlet a



gráfokkal szemléltethető. (A vastag vonalak járulékait az F és G -re vonatkozó csatolt Dyson egyenletek megoldásai adják szelfkonzisztensen meghatározott sajátenergiákkal.)

(III. 1. 7.)-ben $g_{p,p',\lambda}$ az elektron-fonon csatolási mátrixelem, melyet most, a λ polarizáció mellett, csak az impulzusátadástól függőnek tételeztünk fel. Ez a feltevés jogosult, ha az elektronállapot anizotrópiája elhanyagolható [31]. Mi ebben a fejezetben mindenfajta anizotrópiát elhanyagolunk (az elektronspektrum, fononspektrum és elektron-fonon mátrixelem anizotrópiáját egyaránt). Ez megengedhető, ha feltételezzük, hogy rendszerünkben szennyezések vannak jelen, ami által a különféle anizotrópia effektusok kiátlagolódnak és így a retardáció hatása szeparáltan vizsgálható. Az anizotróp járulékok hatását később, a IV. fejezetben, külön megvizsgáljuk.

$D_\lambda(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}')$ a renormált fonon-Green függvény, amely jó közelítésben független a mágneses tértől [32]. Ennek az az oka, hogy a



típusú fonon-polarizációs gráfokhoz a fő járulék egy jóval a Fermi szint alatti elektron jóval a Fermi szint fölé való gerjesztéséből adódik, melyet a mágneses tér befolyásolni nem tud, hiszen a jellegzetes energiák igen eltérő nagyságrendűek: az elektroné $\varepsilon_F \cong 10$ eV, a fononoké $\omega_D \cong 10^{-2}$ eV, $k_B T \cong 10^{-3}$ eV ($T = 10$ °K-nél), míg a ciklotron frekvencia, $\omega_c \cong \frac{eH}{mc}$, még $H = 10^3$ gauss esetén is csak 10^{-5} eV nagyságrendű.

V_c a Coulomb kölcsönhatásnak az a része, mely a renormalizációs és árnyékolási effektusok figyelembevétele után megmarad.

A $\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$, $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ imaginárius frekvenciától függő sajátenergiákból az erőscsatolású problémát meghatározó energia függő sajátenergiák a komplex ω -síkon az imaginárius tengelyről a valós tengelyre való analitikus folytatással nyerhetők.

III. 2. Erős csatolású egyenletek $T \lesssim T_c$ -nél

A $T \lesssim T_c$ -nél érvényes egyenletek levezetéséhez a következő feltevéseket tesszük: 1. $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ és $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ kicsik, valamint 2. $\mathbf{A}(\mathbf{R})$, $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ és 3. $\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ R -nek lassan változó függvényei a ξ_0 hosszön belül. A $\Delta(\mathbf{R}) \rightarrow \Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ általánosítástól eltekintve az 1. és 2. feltevések ugyanazok, mint a II. fejezetben tárgyaltak. A 3. feltevés is kézenfekvő, hiszen $T = T_c$ -nél Σ_1 R -függetlenné válik a mágneses térnek a normál anyagba való homogén behatolása miatt, $T \lesssim T_c$ -nél Σ_1 R -függése csak $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ és $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ lassú R -függését tükrözheti.

A Green függvények közelítő meghatározásának a menete a következő. A (III. 1.3.), (III. 1.4.) egyenleteket a feltételezett kis mennyiségek szerint harmadrendig kifejtjük és az egyforma rendű tagokat az egyenlet két oldalán egyenlővé tesszük. Így $G^{(0)}$, $G^{(1)}$ stb.-re algebrai egyenletek adódnak. Σ_1 és Σ_2 \mathbf{p} -szerinti deriváltjait elhanyagoljuk, mivel izotróp esetet vizsgálunk és ekkor a sajátenergiák \mathbf{p} -szerinti változása igen lassú [25]. Továbbá az $\varepsilon(\mathbf{p})$ Bloch energiákra effektív tömeges közelítést tételezünk fel ($\varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m^* - \mu_0$) $\Sigma_1(i\omega, p, R)$ és $\Sigma_1(-i\omega, p, R)$ helyett Σ_1 ω -ban páros és páratlan részeit vezetjük be:

$$f(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \frac{1}{2} [\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) - \Sigma_1(-i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})]$$

$$\mu(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \frac{1}{2} [\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \Sigma_1(-i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})]$$

Így a Green függvények következő, közelítő kifejezéséhez jutunk*

$$\begin{aligned} O_i &\equiv \nabla_{R_i} - \frac{2ie}{c} A_i, \quad [] \equiv [-(i\omega - f)^2 + (\varepsilon + \mu)^2] \\ \bar{F}_\omega^+(\mathbf{p}, \mathbf{R}) &= \frac{\Sigma_2}{[]} - \frac{i}{m^*} \frac{i\omega - f}{[]^2} p_i O_i^* \Sigma_2^* - \\ &- \frac{i}{m^*} \frac{\Sigma_2^*}{[]^2} p_i \frac{\partial f}{\partial R_i} - \frac{\Sigma_2^* |\Sigma_2|^2}{[]^2} + \frac{1}{4m^*} \frac{\varepsilon + \mu}{[]^2} O_i^* O_i^* \Sigma_2^* + \\ &+ \frac{1}{4m^{*2}} (p_i O_i^*)^2 \Sigma_2^* \left[\frac{2}{[]^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial (\varepsilon + \mu)^2} \frac{1}{[]} \right] - \frac{1}{2m^*} \frac{1}{[]^2} \nabla_{R_i} \mu O_i^* \Sigma_2^* - \\ &- \frac{2}{m^{*2}} \frac{i\omega - f}{[]^3} (p_i \nabla_{R_i} f) (p_j O_{R_j}^*) \Sigma_2^* + \\ &+ \frac{1}{4m^{*2}} \frac{\Sigma_2^*}{[]^3} 2 \left[\frac{4\varepsilon + \mu^2}{[]} - 2 \right] \{ (i\omega - f) (p_i \nabla_{R_i})^2 f + (\varepsilon + \mu) (p_i \nabla_{R_i})^2 \mu \} - \\ &- \frac{2}{m^{*2}} \frac{\Sigma_2^*}{[]^3} (p_i \nabla_{R_i} f)^2 + \frac{1}{2m^*} \frac{\Sigma_2^*}{[]^3} (\varepsilon + \mu) \left[\frac{4(\varepsilon + \mu)^2}{[]} - 2 \right] \{ (\nabla_{R_i} f)^2 + (\nabla_{R_i} \mu)^2 \} - \end{aligned}$$

* Azonos indexekre összegzés van. Továbbá a Σ_2 , f és μ függvényekben szereplő változókat nem írjuk ki, a jobb áttekinthetőség kedvéért.

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4m^*} \frac{\Sigma_2^*}{[\]^2} \left[\frac{4(i\omega - f)(\varepsilon + \mu)}{[\]} \nabla_{\mathbf{R}}^2 f + \left(\frac{4(\varepsilon + \mu)^2}{[\]} - 1 \right) \nabla_{\mathbf{R}}^2 \mu \right] + \\
& + \frac{1}{2m^*} \frac{\Sigma_2^*}{[\]^4} 2(i\omega - f) 4(\varepsilon + \mu)^2 (\nabla_{R_i} f \nabla_{R_i} \mu)
\end{aligned} \quad (\text{III. 2.1})$$

$$\begin{aligned}
\bar{G}_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -\frac{(i\omega - f) + (\varepsilon + \mu)}{[\]} + \frac{(i\omega - f) + (\varepsilon + \mu)}{[\]^2} |\Sigma_2|^2 - \\
& -\frac{i}{2m^*} \frac{1}{[\]^2} [\Sigma_2^* p_i O_i \Sigma_2 - \Sigma_2 p_i O_i^* \Sigma_2^*] - \frac{1}{4m^*} \frac{\nabla_{\mathbf{R}}^2 (f + \nabla_{\mathbf{R}}^2 \mu)}{[\]^3} - \\
& -\frac{1}{4m^*} \frac{1}{[\]^4} [(\nabla_{R_i} \mu)^2 + (\nabla_{R_i} f)^2 + 2\nabla_{R_i} f \nabla_{R_i} \mu] - \\
& -\frac{1}{4m^{*2}} \frac{p_i p_j}{[\]^4} (\nabla_{R_i} \nabla_{R_j} f + \nabla_{R_i} \nabla_{R_j} \mu)
\end{aligned} \quad (\text{III. 2.2})$$

Az áram (II. 2.10.) képletbe behelyettesítve és figyelembe véve, hogy \bar{G} fenti kifejezéséből el nem tűnő járulékok csak a harmadik, p -ben páratlan tag ad, kapjuk

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}(\mathbf{R}) = & \frac{2eT}{m^*} \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \mathbf{p} \bar{G}_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \frac{2eT}{m^*} \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p}{[\]^2} \\
& \left[-\frac{i}{2m^*} \left(\Sigma_2^* p_i \frac{\partial \Sigma_2}{\partial R_i} - \Sigma_2 p_i \frac{\partial \Sigma_2^*}{\partial R_i} \right) - \frac{2e}{m^* c} |\Sigma_2|^2 \cdot A_i(\mathbf{R}) p_i \right]
\end{aligned} \quad (\text{III. 2.3})$$

Ami a (III. 1.6.) „gaageyenletet” illeti, F_ω^+ -ból zérus járulékok adnak az $(\varepsilon + \mu)$ -ben páratlan és az $\varepsilon + \mu$ szerinti deriváltak tartalmazó tagok.*

(III. 1.7.)-ből egyszerűen kaphatók a $f(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ és $\mu(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ -t meghatározó egyenletek: f egyenletébe \bar{G}_ω ω -ban páratlan, μ egyenletébe \bar{G}_ω ω -ban páros része jön csak be. Így a következő egyenletekhez jutunk

$$[\] \equiv [-(i\omega' - f(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R}))^2 + (\varepsilon' + \mu(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R}))^2]$$

$$f(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega')$$

$$\left[\frac{i\omega' - f(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]} + \frac{i\omega' - f(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]^2} |\Sigma_2(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})|^2 + A(\nabla_{\mathbf{R}}^2 f, \nabla_{\mathbf{R}} f \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \mu) \right], \quad (\text{III. 2.4})$$

* Jogos $\mu = \text{konst}$ -t venni ezekben a tagokban, mert amint később látni fogjuk legalacsonyabb rendben μ R -független, \mathbf{p} -függése az izotropia miatt elhanyagolható, ω -függésének elhanyagolását Eliashberg [25] mutatta ki ($T = 0$ -ra).

$$\mu(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \frac{\varepsilon' + \mu}{[\]'} + \frac{\varepsilon' + \mu}{[\]'^2} |\Sigma_2|^2 - \\ - \frac{i}{2m^*} \frac{1}{[\]'^2} (\Sigma_2^* p'_i O_i \Sigma_2 - \Sigma_2 p'_i O_i^* \Sigma_2^*) + B(\nabla_R^2 \mu, (\nabla_{R_i} \mu)^2, (\nabla_{R_i} f)^2) \Big], \quad (\text{III. 2.5})$$

$$\Sigma_2^*(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ \left[\frac{\Sigma_2^*(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]'} - \frac{\Sigma_2^* |\Sigma_2|^2}{[\]'^2} + \frac{1}{2m^{*2}} (p'_i O_i^*)^2 \Sigma_2^* \frac{1}{[\]'^2} - \right. \\ \left. - \frac{i}{m^*} \frac{i\omega' - f}{[\]'^2} p'_i O_i^* \Sigma_2^* - \frac{i}{m^*} \frac{\Sigma_2^* p'_i \frac{\partial f}{\partial R_i}}{[\]'^2} + \right. \\ \left. + C(\nabla_R \mu \mathbf{O}^* \Sigma_2^*, \nabla_R f \mathbf{O}^* \Sigma_2^*, \nabla_R^2 f, (\nabla_R f)^2, \nabla_R^2 \mu, \nabla_R f \nabla_R \mu) \right] \quad (\text{III. 2.6})$$

Az $A(\)$, $B(\)$ és $C(\)$ függvényeket nem írtuk ki részletesen, mert mint alább kiderül, $T \cong T_c$ -nél elhanyagolhatók.

Az f , μ és Σ_2 függvények analitikus folytatása az ω változóban a jól ismert módon hajtható végre [33]. Nekünk azonban nem lesz szükségünk arra, hogy az analitikus folytatást explicite elvégezzük, csak arra kell ügyelnünk, hogy a következő lépésként elvégzendő hőmérséklet szerinti sorfejtésnél figyelembe vegyük, hogy a sajátenergiák $i\omega$ változója tulajdonképpen energiát és nem hőmérsékletet jelent.*

Most fejtsük ki a sajátenergiás részeket $(T_c - T)/T_c$ egész és feles hatványait tartalmazó tagokra $((T_c - T)/T_c)$ megfelelő hatványát és a kifejtési együtthatót összeolvasztva jelöljük:

$$f(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = f^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + f^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \dots, \quad (\text{III. 2.7})$$

$$\mu(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \mu^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \mu^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \dots, \quad (\text{III. 2.8})$$

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Sigma_2^{(1/2)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \Sigma_2^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \Sigma_2^{(3/2)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \dots \quad (\text{III. 2.9})$$

Megjegyezzük, hogy a (III. 2.4.)—(III. 2.6.) egyenletek szerkezetéből következik, hogy Σ_2 kifejtésében $(T_c - T)/T_c$ feles; f és μ kifejtésében pedig $(T_c - T)/T_c$ egész hatványai lépnek fel.

Fejtsük ki a (III. 2.4.)—(III. 2.6.) egyenletekben szereplő

$$[\] \equiv -(i\omega - f)^2 + (\varepsilon + \mu)^2$$

kifejezést is:

$$[\] = [\]_0 + 2(i\omega - f^{(0)})f^{(1)} + 2(\varepsilon + \mu^{(0)})\mu^{(1)} + \dots \quad (\text{III. 2.10})$$

ahol

$$[\]_0 = -(i\omega - f^{(0)})^2 + (\varepsilon + \mu^{(0)})^2.$$

* A sajátenergiák tulajdonképpeni T függését jelölő változót nem írtuk ki.

A (III. 2.7.)—(III. 2.10.) kifejezéseket behelyettesítjük a (III. 2.4.)—(III. 2.6.) egyenletekbe és az egyforma rendű tagokat az egyenletek két oldalán egyenlővé tesszük $[(T_c - T)/T_c]^{1/2}$ -et az eddig használt kis mennyiségekkel (∇_R, A) egyforma rendűnek tekintve. Így a kifejtések legalacsonyabb rendű tagjaira a következő egyenleteket kapjuk:

$$f^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{i\omega' - f^{(0)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\mathbf{J}'_0]}$$

$$\mu^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{\varepsilon' + \mu^{(0)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\mathbf{J}'_0]}$$

$$\Sigma_2^{*(1/2)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{\Sigma_2^{*(1/2)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\mathbf{J}'_0]}$$

ahonnan azonnal adódik, hogy $f^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = f^{(0)}(i\omega, \mathbf{p})$, független R -től és hasonlóan $\mu^{(0)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \mu^{(0)}(i\omega, \mathbf{p})$ is.

Továbbá

$$\Sigma_2^{*(1/2)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Phi^*(i\omega, \mathbf{p}) \Delta^*(\mathbf{R}) \quad (\text{III. 2.11})$$

ahol $\Phi^*(i\omega, \mathbf{p})$ -t a

$$\Phi^*(i\omega, \mathbf{p}) = -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{\Phi^*(i\omega', \mathbf{p}')}{[\mathbf{J}'_0]} \quad (\text{III. 2.12})$$

egyenlet határozza meg. Az ω_c jelölésben a c index arra utal, hogy $T = T_c$ -t kell az $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$ kifejezésbe helyettesíteni; $[\mathbf{J}'_0]$ -nél a felső vessző azt jelöli, hogy \mathbf{p}' és ω' változókat kell a zárójelben levő kifejezésbe helyezni:

$$[\mathbf{J}'_0] \equiv -(i\omega' - f^{(0)}(i\omega', \mathbf{p}'))^2 + (\varepsilon' + \mu^{(0)}(i\omega', \mathbf{p}'))^2.$$

Az $f^{(0)}, \mu^{(0)}$ és Φ függvények ugyanazok, mint amelyek a mágneses tér nélküli erős csatolású problémában T_c -hez elég közeli hőmérsékletek esetén szerepelnek. Így pl. $\Phi(\omega, \mathbf{p})$, $\Phi(i\omega, \mathbf{p})$ analitikus folytatása a valós ω tengelyre, jellemzi a párrkorrelációs függvény (gap-függvény) energiafüggését T_c közelében [27].

Minthogy $f(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ és $\mu(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ legalacsonyabb (nullad) rendben R -től függetleneknek adódtak és az R függés csak másodrendben jön be, a (III. 2.4.)—(III. 2.6.) egyenletekben szereplő A, B és C függvények továbbá (III. 2.6.)-ban a $\Sigma_2^* p_i \nabla_{R_i} f$ -fel arányos tag járuléka elhanyagolhatók, mert ezek negyed- vagy magasabbrendűek.

A $(T_c - T)/T_c$ -ben elsőrendű, azaz másodrendűen kicsiny tagokra vonatkozó egyenletek a következők

$$\begin{aligned} f^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \left[\frac{f^{(1)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\mathbf{J}'_0]} + \right. \\ & + \frac{i\omega' - f^{(0)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\mathbf{J}'_0]^2} (2(i\omega' - f^{(0)})f^{(1)} + 2(\varepsilon' + \mu^{(0)})\mu^{(1)}) + \frac{i\omega' - f^{(0)}}{[\mathbf{J}'_0]^2} |\Sigma_2^{(1/2)}|^2 \Big] - \\ & - \frac{T_c - T}{T_c} T_c \left[\frac{\partial}{\partial T} T \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{i\omega' - f^{(0)}}{[\mathbf{J}'_0]} \right]_{T=T_c}, \quad (\text{III. 2.13}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -T_c \sum_{\omega_c'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ & \left[\frac{\mu^{(1)}}{[\]_0'} + \frac{\varepsilon' + \mu^{(0)}}{[\]_0'^2} (2(i\omega' - f^{(0)})f^{(1)} + 2(\varepsilon' + \mu^{(0)})\mu^{(1)}) + \frac{\varepsilon' + \mu^{(0)}}{[\]_0'^2} |\Sigma_2^{(1/2)}|^2 \right] + \\ & + \frac{T_c - T}{T_c} T_c \left[\frac{\partial}{\partial T} T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \frac{\varepsilon' + \mu^{(0)}}{[\]_0'} \right]_{T=T_c}, \quad (\text{III. 2.14}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma_2^{*(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -T_c \sum_{\omega_c'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ & \left[\frac{\Sigma_2^{*(1)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]_0'} - \frac{i}{m^*} \frac{i\omega' - f^{(0)}}{[\]_0'^2} p'_1 O_i^* \Sigma_2^{(1/2)*} \right] \quad (\text{III. 2.15}) \end{aligned}$$

(III. 2.11.)-et figyelembe véve írhatjuk, hogy

$$f^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = g(i\omega, \mathbf{p}) \frac{T_c - T}{T_c} + h(i\omega, \mathbf{p}) |\Delta(\mathbf{R})|^2 \quad (\text{III. 2.16})$$

$$\mu^{(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = v(i\omega, \mathbf{p}) \frac{T_c - T}{T_c} + \Pi(i\omega, \mathbf{p}) |\Delta(\mathbf{R})|^2 \quad (\text{III. 2.17})$$

és (III. 2.13.), (III. 2.14.)-be behelyettesítve a g, h, Π és v függvényekre a következő egyenletek adódnak:

$$\begin{aligned} g(i\omega, \mathbf{p}) = & -T_c \sum_{\omega_c'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ & \left[\frac{g(i\omega', \mathbf{p}')}{[\]_0'} + \frac{2(i\omega' - f^{(0)})}{[\]_0'^2} ((i\omega' - f^{(0)})g + (\varepsilon' + \mu^{(0)})v) + \frac{i\omega'/T_c}{1 + \exp\left(\frac{-i\omega'}{T_c}\right)} \frac{i\omega' - f^{(0)}}{[\]_0'} \right] \quad (\text{III. 2.18}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h(i\omega, \mathbf{p}) = & -T_c \sum_{\Phi_c'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ & \left[\frac{h(i\omega')}{[\]_0'} + \frac{2(i\omega' - f^{(0)})}{[\]_0'^2} ((i\omega' - f^{(0)})h + (\varepsilon' + \mu^{(0)})\Pi) + \frac{|\Phi(i\omega')|^2}{[\]_0'^2} (i\omega' - f^{(0)}) \right] \quad (\text{III. 2.19}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v(i\omega, \mathbf{p}) = & -T_c \sum_{\omega_c'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega-i\omega') \\ & \left[-\frac{v(i\omega', \mathbf{p}')}{[\]_0'} + \frac{2(\varepsilon' + \mu^{(0)})}{[\]_0'^2} ((i\omega' - f^{(0)})g + (\varepsilon' + \mu^{(0)})v) + \frac{i\omega'/T_c}{1 + \exp\left(\frac{-i\omega'}{T_c}\right)} \frac{\varepsilon' + \mu^{(0)}}{[\]_0'} \right] \quad (\text{III. 2.20}) \end{aligned}$$

$$\Pi(i\omega, \mathbf{p}) = -T_c \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega')$$

$$\left[-\frac{\Pi(i\omega', p')}{[\]_0'} + \frac{2(\varepsilon' + \mu^{(0)})}{[\]_0'^2} ((i\omega' - f^{(0)})h + (\varepsilon' + \mu^{(0)})\Pi) + \frac{|\Phi(i\omega', p')|^2}{[\]_0'^2} (\varepsilon' + \mu^{(0)}) \right]$$

(III. 2.21)

Kérdés, hogy a $\Sigma_2^{*(1)}$ -re vonatkozó (III. 2.15.) egyenlet ad-e információt az eddig még határozatlan $\Delta(\mathbf{R})$ függvényre. Szorozzuk meg a (III. 2.15.) egyenlet mindkét oldalát $\frac{\Phi^*(i\omega, p)}{[\]_0}$ -al, integráljuk \mathbf{p} -re és szummázzuk ω -ra, majd használjuk ki (III. 2.12.)-t:

$$\sum_{\omega} \int d\mathbf{p} \frac{\Phi^*(i\omega, p)}{[\]_0} \Sigma_2^{*(1)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T_c \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \int d\mathbf{p}' \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}$$

$$V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{\Phi^*(i\omega, p)}{[\]_0}$$

$$\left[\frac{\Sigma_2^{*(1)}(\mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]_0'} - \frac{i}{m^*} \frac{i\omega' - f^{(0)}(i\omega', p')}{[\]_0'^2} p'_i O_i^* \Delta^*(R) \Phi^*(i\omega', \mathbf{p}') \right] =$$

$$= \sum_{\omega'} \int d\mathbf{p}' \Phi^*(i\omega', \mathbf{p}') \frac{\Sigma_2^{*(1)}(i\omega', \mathbf{p}', \mathbf{R})}{[\]_0'} -$$

$$- \frac{i}{m^*} \sum_{\omega'} \int d\mathbf{p}' (\Phi^*(i\omega', \mathbf{p}'))^2 \frac{i\omega' - f^{(0)}(i\omega', p')}{[\]_0'^2} p'_i O_i^* \Delta^*(R)$$

Megjegyezzük, hogy az utolsó lépésben $V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega')$ $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ -ben és $i\omega - i\omega'$ -ben való párosságát is kihasználtuk. Látszik, hogy a bal oldal és a jobb oldal első tagja kifejtik egymást és marad

$$\sum_{\omega} \int d\mathbf{p} (\Phi^*(i\omega, \mathbf{p}))^2 \frac{i\omega - f^{(0)}}{[\]_0^2} p_i O_i^* \Delta^*(R) = 0.$$

$(i\omega - f^{(0)})\omega$ -ban páratlan függvény lévén (Σ_2 és így Φ ω -függése párosnak választható ez a kiejezés Δ -tól függetlenül zérus, $\Delta(\mathbf{R})$ -re semmilyen megkötést nem ad.

Vizsgáljuk meg $\Sigma_2^{(3/2)*}$ -ra vonatkozó egyenletet, mely (III. 2.6.)-nak a harmadrendűen kicsiny mennyiségekre vonatkozó részéből kapható

$$\Sigma_2^{(3/2)*}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T_c \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega')$$

$$\left[\frac{\Sigma_2^{(3/2)*}}{[\]_0'} - \frac{2(i\omega' - f^{(0)})f^{(1)} + 2(\varepsilon' + \mu^{(0)})\mu^{(1)}}{[\]_0'^2} \Sigma_2^{(1/2)*} - \right.$$

$$\left. - \frac{\Sigma_2^{(1/2)} |\Sigma_2^{(1/2)}|^2}{[\]_0'^2} + \frac{1}{2m^{*2}} (\mathbf{p}' \cdot \mathbf{O}_i^*)^2 \Sigma_2^{(1/2)*} \frac{1}{[\]_0'^2} \right] -$$

$$- \frac{T_c - T}{T_c} T_c \left[-\frac{\partial}{\partial T} T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}', i\omega - i\omega') \frac{\Sigma_2^{(1/2)*}}{[\]_0'} \right]_{T=T_c}$$

Szorozzuk a jobb és bal oldalt $\frac{1}{[\int_0^1]} \Phi^*(i\omega, p)$ -vel, és integráljuk \mathbf{p} -re, szummázzunk ω -ra és használjuk ki (III. 2.12.)-t. Ekkor azt találjuk, hogy a bal oldal és a jobb oldal első tagja kiejti egymást és marad*

$$\sum_{\omega'} \int d\mathbf{p}' \left[-\frac{2(i\omega' - f^{(0)})f^{(1)} + 2(\varepsilon' + \mu^{(0)})\mu^{(1)}}{[\int_0^1]^2} (\Phi^*(i\omega', \mathbf{p}'))^2 \Delta^*(\mathbf{R}) - \right. \\ \left. - \frac{(\Phi^*)^2 |\Phi|^2}{[\int_0^1]^2} |\Delta(\mathbf{R})|^2 \Delta^*(\mathbf{R}) + \frac{1}{2m^{*2}} p'_i p'_j \frac{(\Phi^*)^2}{[\int_0^1]^2} O_i^* O_j^* \Delta^*(\mathbf{R}) - \right. \\ \left. - \frac{T_c - T}{T_c} \frac{i\omega'_c}{1 + \exp\left(\frac{-i\omega'_c}{T_c}\right)} \frac{(\Phi^*)^2}{[\int_0^1]} \Delta^*(\mathbf{R}) \right] = 0$$

Behelyettesítve $f^{(1)}$ és $\mu^{(1)}$ (III. 2.16.) és (III. 2.17.) felbontását, a következő alakra jutunk

$$\frac{a}{2m^*} \left(\mathbf{V}_R + \frac{2ie}{c} A(\mathbf{R}) \right)^2 \Delta^*(\mathbf{R}) + \left[b \frac{T_c - T}{T_c} - d |\Delta(\mathbf{R})|^2 \right] \Delta^*(\mathbf{R}) = 0$$

ahol

$$a = \frac{1}{3m^*} \sum_{\omega_c} \int d\mathbf{p} p^2 \frac{(\Phi^*)^2}{[\int_0^1]^2} \quad (\text{III. 2.22})$$

$$b = - \sum_{\omega_c} \int d\mathbf{p} \frac{(\Phi^*)^2}{[\int_0^1]^2} \left[\frac{(i\omega_c/T_c)}{1 + \exp\left(\frac{-i\omega_c}{T_c}\right)} + \frac{2(i\omega - f^{(0)})g + 2(\varepsilon + \mu^{(0)})v}{[\int_0^1]} \right] \quad (\text{III. 2.23})$$

$$d = \sum_{\omega_c} \int d\mathbf{p} \frac{(\Phi^*)^2}{[\int_0^1]^2} [|\Phi|^2 + 2(i\omega - f^{(0)})h + 2(\varepsilon + \mu^{(0)})II]. \quad (\text{III. 2.24})$$

Az áram kifejezését megkapjuk, ha (III. 2.11.)-et (III. 2.3.)-ba helyettesítjük

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}) = C \left[-\frac{ie}{m} \left(\Delta^*(\mathbf{R}) \frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{R}} - \Delta(\mathbf{R}) \frac{\partial \Delta^*}{\partial \mathbf{R}} \right) - \frac{4e^2}{m^*c} A(\mathbf{R}) |\Delta(\mathbf{R})|^2 \right],$$

ahol

$$C = T_c \frac{1}{3m^*} \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2 |\Phi|^2}{[\int_0^1]^2} \frac{m}{m^*}.$$

* Kihhasználjuk a

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(T \sum_{\omega} \dots \right) = \frac{1}{T} \sum_{\omega} \frac{i\omega}{1 + e^{-i\omega/T}} \dots \text{ egyenlőséget is.}$$

Ha bevezetjük a $\psi(\mathbf{R})$ rendparamétert a $\psi(\mathbf{R}) = \sqrt{C\Delta(\mathbf{R})}$ választással, akkor az

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{V}_R + \frac{2ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)^2 \psi^*(\mathbf{R}) + \left[\alpha'_c \frac{T_c - T}{T_c} - \beta_c |\psi(\mathbf{R})|^2 \right] \psi^*(\mathbf{R}) = 0$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}) = -\frac{ie}{m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \mathbf{R}} \right) - \frac{4e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{R}) |\psi(\mathbf{R})|^2;$$

$$\alpha'_c = \frac{b}{a} \frac{m^*}{m}, \quad \beta_c = \frac{d}{ac} \frac{m^*}{m},$$

egyenletekhez jutunk, melyek (I. 8.), (I. 9.)-cel azonosak (ha azokba $e^* = 2e$ -t írunk, természetesen). Így tehát bebizonyítottuk, hogy a Ginzburg—Landau egyenletek eredeti formájukban érvényesek erős csatolású, izotróp szupravezetők esetében is, valamint explicit kifejezéseket nyertünk az egyenletek paramétereire ((III. 2.22.)—(III. 2.24.) kiegészítve Φ stb. egyenleteivel.) Az eredmény első része lényegében annak a következménye, hogy $T \simeq T_c$ esetén $\Sigma_2^{(1/2)}(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R})$ R -függő és $(i\omega, \mathbf{p})$ -függő tényezők szorzataként adódik, ami azt a fizikai tényt tükrözi, hogy a pár relatív- és tömegközépponti mozgása függetlenné válik a lokalitásnak megfelelően. A paraméterek kifejezéseinek diszkussziójára a következő pontban térünk rá.

*

III. 3. Az erős csatolású Ginzburg—Landau egyenletek paramétereinek diszkussziója

Az α'_c, β_c paraméterek az energiafüggő $\Phi(\omega), f^{(0)}(\omega)$, stb., függvények segítségével vannak kifejezve, melyek a mágneses térerősségtől függetlenek, és a térmentes ($H=0$) esetnek megfelelő erős csatolású probléma leírását adják T_c közelében. Az α'_c, β_c -re kapott kifejezéseink átmennek a Gorkov-féle, (II.1.9.)-ben megadott képletekbe, ha a retardációs és csillapodási effektusokat elhanyagoljuk, ami a gyenge csatolású esetre való áttérést jelenti. Felmerül a kérdés, hogy milyen mértékű a paraméterek numerikus értékeinek eltérése a Gorkov-féle képletek adta értékektől, azaz milyen mérvű a retardációs és csillapodási effektusok hatása α'_c és β_c értékeire? Másrészt pedig kérdés, hogy a megadott formulák a kísérleti eredményekkel összhangban vannak-e?

A formulák kiértékelése igen hosszadalmas numerikus számolást igényel. Mivel azonban, mint említettük, a paraméterek az $A=0$ esetnek megfelelő problémában is szereplő függvényekkel vannak kifejezve, bizonyos információt, pontosabban a két paraméter egy kombinációját *Swihart, Scalapino és Wada* [28] munkájában közölt számolási eredményekből kikövetkeztethetjük. Az említett szerzők ólom esetére numerikusan meghatározták a zérus hőmérsékleti kondenzációs energiát, $H_c^2(0)/8\pi$ -t és $24\,900 \pm 2000$ erg/cm³ értéket kaptak. Ismeretes, hogy $H_c(T)$ hőmérsékletfüggése erős csatolású szupravezetőkre hasonlóképpen, mint gyenge csatolásúakra, jó közelítésben $H_c(T) = H_c(0) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right)$, [28] és így $H_c^2(0)/8\pi$ kapcsó-

latba hozható az α'_c , β_c paraméterek egy kombinációjával. Nevezetesen, (I. 7) felhasználásával

$$\frac{H_c^2(0)}{8\pi} = \frac{\alpha'^2_c}{8\beta_c}. \quad (\text{III. 3.1})$$

További információt, pontosabban $H_{c_2} \left(= \alpha'_c \cdot \frac{mc}{eh} \frac{T_c - T}{T_c} \right)$ numerikus értékét Pb esetére Yorke és Bardasis [14], valamint Eilenberger és Ambegaokar [13] cikkéből vehetjük. Az említett szerzők 1967-ben szintén leszámaztatták az erős csatolású Ginzburg—Landau egyenleteket és más módszerrel* ugyanazon eredményre jutottak, mint a szerző 1966-os cikkében. Ami a numerikus számolást illeti, Yorke és Bardasis a linearizált első Ginzburg—Landau egyenlet (gapegyenlet) sajátérték-problémájának numerikus megoldásával meghatározták H_{c_2} -t, Eilenberger és Ambegaokarnak sikerült H_{c_2} kifejezését olyan módon átalakítani, hogy a fellépő integrálok az erős csatolású probléma bizonyos paramétereinek megfigyelt és BCS értékeivel legyenek közelítőleg kifejezve. Így a következő számított értékek állnak rendelkezésünkre Pb esetén:

$$-\left. \frac{dH_{c_2}}{dT} \right|_{T_c} \text{ gauss}/^\circ\text{K}$$

84—93** Yorke, Bardasis

100 Eilenberger, Ambegaokar

A BCS—Gorkov értékek az említett két mennyiségre ólom esetében a következők:

$$H_c^2(0)/8\pi \text{ erg/cm}^3 \quad -\left. \frac{dH_{c_2}}{dT} \right|_{T_c} \text{ gauss}/^\circ\text{K}$$

31 000 ± 2000

56,

azaz az erős csatolású és BCS—Gorkov értékek eltérése 20, illetve 100%.

Ami a kísérleti eredményeket illeti, ismeretes H_c [34] és $H_{c_3}/H_c|_{T_c}$ [35], [36], [37] kísérleti értéke ólom esetében. Így $H_c^2(0)/8\pi|_{\text{kis}} = 25\,630 \pm 3 \text{ erg/cm}^3$ adódik, $H_{c_3}/H_c|_{T_c}$ -re pedig különböző szerzők a következő értékeket adják meg:

$H_{c_3}/H_c|_{T_c}$

0,89 Cardona, Rosenblum [35]

0,84 Fisher [36]

0,59 Smith, Cardona [37].

* Ez a módszer Gorkov eljárásának általánosítása. A mi módszerünkkel ellentétben, csak akkor alkalmazható, ha a sajátenergiák impulzusfüggését a kiindulástól kezdve elhanyagoljuk, tehát alkalmatlan anizotróp effektusok tárgyalására, amire a következő fejezetben térünk rá.

** A két különböző elméleti érték a $g_{\text{long}}^2/g_{\text{tranzv}}^2$ hányados két különböző értékének felel meg, ahol g_λ ($\lambda = \text{long., tranzv.}$) a konstansnak feltételezett elektron — fonon csatolási állandó.

H_{c3}/H_c -ből H_{c3}/H_{c2} ismeretében H_{c2}/H_c -re következtethetünk és így mód nyílik az elmélet és kísérlet összehasonlítására. A H_{c3}/H_{c2} hányadosról már szó volt az I. fejezetben. Ott megállapítottuk, hogy csak a Ginzburg—Landau egyenletek és a határfeltétel *alakján* múlik az az eredmény [22], hogy

$$\frac{H_{c3}}{H_{c2}} = 1,7 \quad (\text{III. 3.2})$$

Érvényes-e (III. 3.2) erős csatolású szupravezetők esetében is? A Ginzburg—Landau egyenletek változatlan alakúak, ezt láttuk az előző pontban. A következő pontban pedig bebizonyítjuk, hogy a határfeltétel sem változik az erős csatolású effektusok figyelembevételének hatására. Így tehát a (III. 3.2.) kifejezés érvényes erős csatolású szupravezetőkre is. Ezután az elmélet és kísérlet összehasonlítása már elvégezhető és a következő eredményt kapjuk:

	$-\frac{dH_{c2}}{dT} \Big _{T_c}$ gauss/°K	κ
kísérlet	101	0,33
erős csatl. elm.	94,3	0,30
BCS—Gorkov	56	0,16

Minthogy $\frac{dH_{c2}}{dT} \Big|_{T_c} = \frac{mc}{e\hbar T_c} \cdot \alpha'_c$ és $\kappa = \frac{mc}{2^{3/2}e\hbar} \sqrt{\frac{\beta_c}{\pi}}$, ezekkel lényegében az α'_c , β_c paraméterek értékeit adtuk meg. A táblázatban feltüntetett számok a kísérleti és elméleti értékeknél a különböző, már idézett, adatok középértékét jelölik. Látható, hogy míg az erős csatolású számított értékek a kísérleti eredményekkel jó egyezésben vannak, a BCS—Gorkov értékektől való eltérés jelentős.

*

III. 4. A határfeltétel levezetése

A fenomenologikus Ginzburg—Landau elméletből adódó határfeltétel a rendparaméter normális deriváltjának eltűnését írja elő a határfelületen (I. I. fejezet), ami elégséges feltétele annak, hogy a határfelületen átfolyó áram zérus legyen. Tehát

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{2ie}{c} \mathbf{A} \right)_n \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{III. 4.1})$$

ahol n a határfelületre merőleges komponenst jelöli. Az előző pontokban arra az eredményre jutottunk, hogy a Ginzburg—Landau egyenletek erős csatolású szupravezetők esetén is érvényesek T_c -hez közeli hőmérsékletek esetén. Hasonló módon, a mikroszkopikus elméletből kiindulva kell azt is megvizsgálnunk, hogy változik-e a határfeltétel a retardációs effektusok miatt, vagy nem. Abrikoszov eljárását [38] fogjuk általánosítani, aki gyenge csatolású szupravezetőkre levezette a határfeltételt is, szupravezető féltér-geometriát tételezve fel.

A szupravezető az $x > 0$ félteret tölti ki. Legyen a vektorpotenciál y irányú és csak x -től függjön:

$$H_0 = H_z = \frac{\partial A_y}{\partial x}, \quad H_x = H_y = 0,$$

$$A_y = H_0(x - x_0).$$

A határfeltételt Abrikoszov a Green függvényekre írja elő, mégpedig:

$$G_\omega(\mathbf{r}; 0, y', z') = G_\omega(0, y, z; \mathbf{r}') = 0$$

és hasonlóan $F_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ -re is. Ez azt jelenti, hogy a határfelületen nem keletkezik és nem tűnik el elektron, azaz nincs töltés áramlás. Nyilvánvaló, hogy egy ilyen problémát vegyes- vagy impulzus reprezentációban tárgyalni igen nehézkes, ezért mi is, eltérve a dolgozat eddigi formalizmusától, a Gorkov-féle utat követjük, melyet a II. 1. pontban vázoltunk.

A határfeltételt kielégítő normálállapotú Green függvény kváziklasszikus közelítésben

$$\tilde{G}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [G_\omega^0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - G_\omega^0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] \cdot e^{\frac{ie}{2c}[A(x) + A(x')](y - y')} \quad (\text{III. 4.2})$$

alakú, ahol $\bar{\mathbf{r}}' = (-x', y', z')$ és G_ω^0 az $A=0$ esetnek megfelelő normál állapotú Green függvény. A (III. 4.2.) Green függvény ugyanazt az egyenletet elégíti ki, mint a végtelen tér esetére vonatkozó, a II. 1. pontban bevezetett \tilde{G} Green függvény, ha feltételezzük, hogy

$$A(-x') = A(x').$$

Mivel minket csak az $x' > 0$ térrész érdekel, egy ilyen feltevés nem korlátozza az általánosságot. Meg kell jegyeznünk, hogy a Gorkov-féle módszer csak azzal a már kezdetben kihasználásra kerülő feltevessel alkalmazható az erős-csatolású probléma tárgyalására, hogy a sajátenergiáknak a relatív koordinátától való függése δ -függényszerű, azaz impulzusfüggésük elhanyagolható. Ezt tehát feltesszük a továbbiakban és ez a feltevés jogos is, amint erről már szó volt: az erős csatolás legnagyobb részét abban nyilvánul meg, hogy a sajátenergiás részek erősen frekvenciafüggők. Ekkor a „gapegyenlet” a következő lesz:

$$\begin{aligned} \Sigma_2^*(i\omega, \mathbf{R}) &= -T \sum_{\omega'} V(i\omega - i\omega') F_{\omega'}^+(\mathbf{R}, \mathbf{R}) \cong \\ &\cong -T \sum_{\omega'} V(i\omega - i\omega') \int_{x' > 0} d\mathbf{R}' \tilde{G}_{-\omega'}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) \cdot \tilde{G}_{\omega'}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) \Sigma_2^*(i\omega', \mathbf{R}') \quad (\text{III. 4.3}) \end{aligned}$$

\tilde{G}_ω (III. 4.2) kifejezésében szereplő $G_\omega^0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ Green függvény a normál rendszer Green függvénye zérus mágneses térnél. Ha az elektron-fonon kölcsönhatást ki-kapcsoljuk, akkor ez a szabad rendszer (II. 1.7) képletekkel megadott Green függvényébe megy át. Az elektron-fonon kölcsönhatás hatása a Σ_1 sajátenergián keresztül érvényesül. Ennek ω -ban páros része a kémiai potenciálhoz ad járulékot és ω -füg-

gése elhanyagolható [25], páratlan részével kapcsolatos az ún. renormálási együttható.

$$Z^N(i\omega) = 1 - \frac{f^N(i\omega)}{i\omega},$$

ahol $f^N(i\omega)$ a $\Sigma_1(i\omega)$ sajátenergia ω -ban páratlan része normál rendszer és zérus mágneses tér esetén. Fellépte miatt az $[i\omega - \varepsilon(p)]^{-1}$ szabad részecske propagátor az $[i\omega Z^N(i\omega) - \varepsilon(p)]^{-1}$ propagátorba megy át, melynek Fourier transzformáltját kell képezni. Minthogy $Z^N(i\omega) \equiv 1$ minden ω -ra [14], ezért egyszerűen

$$G_{\omega}^0(r) = \begin{cases} -\frac{m}{2\pi r} e^{ip_0 r} e^{-\frac{|Z^N(i\omega)\omega|r}{v}}, & \omega > 0 \\ -\frac{m}{2\pi r} e^{-ip_0 r} e^{-\frac{|Z^N(i\omega)\omega|r}{v}}, & \omega < 0 \end{cases} \quad (\text{III. 4.4})$$

$Z^N(i\omega) = 1$ esetén ezt a függvényt a II. 1. pontban diszkutáltuk és megállapítottuk, hogy a ξ_0 koherenciahossznak megfelelő távolság után levág kis ω -k esetén. $Z^N(i\omega) > 1$ ezt a levágási hosszt csökkenti.

(III. 4.2)-t (III. 4.3)-ba behelyettesítve kapjuk

$$\begin{aligned} \Sigma_2^*(i\omega, \mathbf{R}) = & -T \sum_{\omega'} V(i\omega - i\omega') \int_{x'=0} d\mathbf{R}' [G_{\omega'}^0(|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|) \cdot G_{-\omega'}^0(|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|) + \\ & + G_{\omega'}^0(|\bar{\mathbf{R}}' - \mathbf{R}|) G_{-\omega'}^0(|\bar{\mathbf{R}}' - \mathbf{R}|)] \exp \left\{ \frac{ieH_0}{c} (x + x' - 2x_0)(y - y') \right\} \cdot \Sigma_2^*(i\omega', \mathbf{R}') \quad (\text{III. 4.5}) \end{aligned}$$

A ki nem írt $G_{\omega'}^0(|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|) G_{-\omega'}^0(|\bar{\mathbf{R}}' - \mathbf{R}|)$ típusú két szorzat (III. 4.4)-ből láthatóan $e^{ip_0[|\mathbf{R}' - \mathbf{R}| - |\bar{\mathbf{R}}' - \mathbf{R}|]}$ oszcilláció faktort tartalmaz, mely csak akkor vezet nem zérus eredményhez az integrálás révén, ha $[|\mathbf{R}' - \mathbf{R}| - |\bar{\mathbf{R}}' - \mathbf{R}|] \lesssim p_0^{-1}$, ez a feltétel csak az $x' = 0$ vagy $x = 0$ körüli p_0^{-1} kiterjedésű, tehát atomi méretű, rétegben teljesül. Így ezek a tagok elhanyagolhatók.

$\Sigma_2^*(i\omega, \mathbf{R})$ -re olyan megoldást keresünk, mely ω -n kívül csak x -től függ. Mivel a Ginzburg—Landau tartományban ξ_0 nagyságrendű távolságon minden érdekes mennyiség lassan változik, a (III. 4.5) képletben mind a mágneses térerősséget tartalmazó exponenciálist, mind $\Sigma_2^*(i\omega', x')$ -t kifejtethetjük x körül $(x - x')$ szerint:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{ieH_0}{c} (x + x' - 2x_0)(y - y') \right\} \cong & 1 + \frac{ieH_0}{c} 2(x - x_0)(y - y') - \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{2eH_0}{c} \right)^2 (y - y')^2 (x - x_0)^2, \end{aligned}$$

$$\Sigma_2^*(i\omega', x') = \Sigma_2^*(i\omega', x) + \frac{d\Sigma_2^*(i\omega', x)}{dx} (x' - x) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \Sigma_2^*(i\omega', x)}{dx^2} (x' - x)^2.$$

Behelyettesítve (III. 4.5)-be, az exponenciális kifejtéséből az elsőrendű tag integrálásnál zérust ad, mivel y' szerint az egész térre integrálni kell és az integrandus

páratlan függvény. (III. 4.4)-et felhasználva kapjuk:

$$\begin{aligned} \Sigma_2^*(i\omega, x) = & -T \sum_{\omega'} V(i\omega - i\omega') \int_{x' > 0} d\mathbf{R}' \cdot \\ & \cdot \left[\left(\frac{m}{2\pi |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} \right)^2 e^{-\frac{2|\omega' Z(i\omega')| |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{v}} + \left(\frac{m}{2\pi |\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|} \right)^2 e^{-\frac{2|\omega' Z(i\omega')| |\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|}{v}} \right] \cdot \\ & \cdot \left\{ \Sigma_2^*(i\omega' x) + \frac{d\Sigma_2^*(i\omega', x)}{dx} (x' - x) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \Sigma_2^*(i\omega', x)}{dx^2} (x' - x)^2 - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{2eH_0}{c} \right)^2 (y' - y)^2 \cdot (x - x_0)^2 \Sigma_2^*(i\omega', x) \right\} \end{aligned} \quad (\text{III. 4.6})$$

Most vizsgáljuk meg a (III. 4.6) egyenletben rendre Σ_2^* , $d\Sigma_2^*/dx$ és $d^2\Sigma_2^*/dx^2$ együtthatóinak függését x -től. A kifejtés nullarendű tagja (Σ_2^*) az

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_{x' > 0} dx' \left[e^{-\frac{2|\omega' Z| |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{v}} \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^2} + e^{-\frac{2|\omega' Z| |\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|}{v}} \frac{1}{|\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|^2} \right] = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\frac{2|\omega' Z| |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{v}} \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^2} \end{aligned} \quad (\text{III. 4.7})$$

tényezővel van megszorozva. (III. 4.7) jobb oldalán álló kifejezés mutatja, hogy ez egy x -től független térfogati tag: az x' szerinti integrálás is az egész $(-\infty, \infty)$ tartományra történik.

Az integrálás egyszerűen elvégezhető és kapjuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}}}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^2} = 4\pi r_{\omega'} \quad (\text{III. 4.8})$$

ahol bevezettük az $r_{\omega'} = 2|\omega' Z(i\omega')|/v$ jelölést.

Most térjünk át az elsőrendű tag x -függésének vizsgálatára. (III. 4.6)-ban $d\Sigma_2^*/dx$ a következő szorzótényezőt tartalmazza:

$$\begin{aligned} J_{\omega'}(x) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \left[\int_{x' > 0} dx' \frac{x' - x}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}} + \int_{x' > 0} dx' \frac{x' - x}{|\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}'|}{r_{\omega'}}} \right] = \\ & = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_x^{\infty} dX \frac{X - x}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}}, \end{aligned} \quad (\text{III. 4.9})$$

ahol most $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'| = [X^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2]^{1/2}$. Hengerkoordinátákra áttérve a

$$J_{\omega'}(x) = 4\pi \int_0^{\infty} r dr \int_x^{\infty} dX \frac{X - x}{X^2 + r^2} e^{-\frac{(X^2 + r^2)^{1/2}}{r_{\omega'}}}$$

integrálhoz jutunk, ahol $r = [(y-y')^2 + (z-z')^2]^{1/2}$. Az r -szerinti integrálást elvégezve kapjuk, hogy

$$J_{\omega'}(x) = -4\pi \int_x^{\infty} (X-x) Ei(-X/r_{\omega'}) dX, \quad (\text{III. 4.10})$$

ahol $Ei(y)$ az integrálexponenciális függvény. (III. 4.10) alapján $J_{\omega'}(x)$ következő tulajdonságai láthatók be: az $x=0$ helyen $J_{\omega'}(0) = \pi r_{\omega'}^2$, utána $J_{\omega'}(x)$ csökken és nagy $x/r_{\omega'}$ értékekre exponenciálisan levág:

$$J_{\omega'}(x) \cong 2\pi r_{\omega'}^2 \frac{e^{-x/r_{\omega'}}}{x/r_{\omega'}}, \quad \text{ha } x \gg r_{\omega'}$$

A karakterisztikus hossz, mely $J_{\omega'}(x)$ levágását jellemzi, $r_{\omega'} = \frac{2}{v} |(2n+1)\pi T Z(i\omega'_n)|$.

Ez $n=0$ esetén egységnyi nagyságrendű faktortól eltekintve megegyezik a $Z(0)$ -lal renormált) BCS koherenciahosszal, ε_0 -lal, mely a Ginzburg—Landau elméletben kicsiny távolságnak számít. $J_{\omega'}(x)$ tehát közelítőleg δ -függvényszerű az $x=0$ hely környékén:

$$J_{\omega'}(x) = C\delta(x). \quad (\text{III. 4.11})$$

ahol C a δ -függvény erőssége:

$$C = \int_0^{\infty} J_{\omega'}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_0^{\infty} dX \frac{X^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|^2} \cdot e^{-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}} = \frac{4\pi}{3} r_{\omega'}^3 \quad (\text{III. 4.12})$$

A másodrendű tag, $\frac{1}{2} \frac{d^2 \Sigma_2^*}{dx^2}$, együtthatója a következő:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \int_{x'=0}^{\infty} dx' \left[\frac{e^{-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}}}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|^2} + \frac{e^{-\frac{|\mathbf{R}-\bar{\mathbf{R}}'|}{r_{\omega'}}}}{|\mathbf{R}-\bar{\mathbf{R}}'|^2} \right] (x'-x)^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' \left[2 \int_0^{\infty} \frac{X^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}} dX - 4x \int_x^{\infty} \frac{X-x}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}} dX \right] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy' dz' dX \frac{X^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|^2} e^{-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}{r_{\omega'}}} - 2x J_{\omega'}(x) = \frac{8\pi}{3} r_{\omega'}^3 - 2Cx\delta(x), \quad (\text{III. 4.13}) \end{aligned}$$

ahol kihasználtuk a (III. 4.9), (III. 4.10) és (III. 4.12) összefüggéseket. Látjuk, hogy (III. 4.13)-ban az első tag x -től független, térfogati tag, míg a második $x\delta(x)$ alakú lévén elhagyható.

Hasonlóképpen belátható az is, hogy (III. 4.6)-ban, a mágneses térerősséget tartalmazó kifejezésben $(x-x_0)^2 \Sigma_2^*$ szorzója x -től független.

Ha most a kapott eredményeinket: (III. 4.8), (III. 4.11) és (III. 4.13)-at (III. 4.6)-ba behelyettesítjük és azt az $x=0$ hely egy kis környezetére kiintegráljuk, a

$$\left. \frac{d\Sigma_2^*(i\omega, x)}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (\text{III. 4.14})$$

összefüggésre jutunk. Figyelembe véve a most is érvényes (III. 2.11) eredményt, mely szerint $\Sigma_2^*(i\omega, x) = \Phi^*(i\omega)\Delta^*(x)$, továbbá azt, hogy a geometria és vektorpotenciál megválasztása miatt $A_n=0$, azt találjuk, hogy (III. 4.14) és (III. 4.1) meg egyeznek. Így tehát erős csatolású szupravezetők esetére is érvényes a *Ginzburg* és *Landau* által bevezetett határfeltétel.

Megjegyezzük, hogy (III. 4.14) figyelembevételével $x>0$ esetén a (III. 4.6) egyenlet a linearizált *Ginzburg*—*Landau* egyenletbe megy át.

*

IV. Kristály anizotrópia hatása szupravezetők mágneses térbeli viselkedésére

IV. 1. Anizotrópia-effektusok szupravezetőkben

A szupravezetés BCS-elméletében [2] ($A=0$ esetén) a Fermi felület közelében konstans v effektív elektron-elektron kölcsönhatás és szférikus Fermi felület van feltételezve. A gap-egyenlet megoldása így izotrópnak adódik. Bizonyos kísérletek, mint pl. alagút-effektus Sn-ben [39] és Pb-ben [40], arra mutattak, hogy az említett feltevések nem mindig jogosultak és a gap-függvény szögfüggő lehet

$$\Delta \rightarrow \Delta(\mathbf{p})$$

amit egy konstanstól eltérő, szögfüggő $v(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ kölcsönhatás eredményezhet [41]. $v(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ szögfüggésének három forrása lehetséges: 1. az elektron-spektrum anizotrópiája, 2. a fonon spektrum anizotrópiája, 3. az elektron-fonon mátrixelem anizotrópiája. A gap-függvény anizotrópiájának konkrét számolása, a szerző tudomása szerint csak Pb esetére található meg az irodalomban (*Bennett* [42]). Bár nem az ólom a legerősebb anizotrópiát mutató szupravezető, azért esett mégis rá *Bennett* választása, mert sávszerkezete és fononspektruma jól ismert. Az elektron-fonon mátrixelem anizotrópiáját *Bennett* nem vette figyelembe azon indoklással, hogy arra vonatkozóan nincs megbízható eredmény az irodalomban. *Bennett* azt találta, hogy ólom esetében a gap-anizotrópia fő forrása a fonon-spektrum anizotrópiájában rejlik és nem az elektron spektrumában.

Ami a mágneses térbeli viselkedést illeti, anizotróp szupravezetőkre *Ginzburg* [15] adta meg a *Ginzburg*—*Landau* egyenletek általánosításait: az I. fejezetben ismertetett *Ginzburg* egyenleteket. Ezen egyenletekben az anizotrópia csak a skalár tömeg helyett megjelenő kifejezés tenzor voltában nyilvánul meg, ami anizotróp behatolási mélységhez és anizotróp felső kritikus mágneses térhez vezet. Sajnálatos módon a tömegtenzorra vonatkozó kísérleti adatok szempontjából az irodalom igen szegény. A behatolási mélység mérése nem könnyű, annak anizotrópiájára vonatkozó kísérleti adatok nem állnak rendelkezésre. *Tilley et al.* [43] mutattak arra rá, hogy H_{c2} anizotrópiáján keresztül II. típusú szupravezetőknel az anizotrópia mint térfogati effektus jelentkezik és így valószínűleg sokkal könnyebben megfigyelhető. A linearizált első *Ginzburg* egyenletet vizsgálva az $m_{\mu\nu}$ tömegtenzor főtengetel rendszerben y irányú mágneses tér és x irányú vektorpotenciál választással

$$H_{c2} = \frac{c|\alpha|}{eh} (m_{xx}m_{zz})^{1/2} \quad (\text{IV. 1.1})$$

eredményt kaptuk. (IV. 1.1) kifejezhető a Ginzburg [15] által bevezetett anizotróp behatolási mélységgel:

$$H_{c2} = \frac{4e}{hc} \lambda_x \lambda_z H_c^2, \quad (\text{IV. 1.2})$$

ahol λ_x ill. λ_z a behatolási mélységek x ill. z irányú áram esetén és H_c a (nem anizotróp) kritikus mágneses tér. H_{c2} anizotrópiáját illetően csak Nb esetére ismeretesek kísérleti eredmények [43], [44]. Mivel azonban a Nb köbös szimmetriájú anyag, tömegtenzorának komponensei meg kell hogy egyezzenek egymással és így a Niobiumra vonatkozó Ginzburg egyenletek anizotrópiát nem mutatnak. Megjegyezzük, hogy az egyenletekben a rendparaméter negyedik deriváltját is figyelembe véve Hohenberg és Werthamer [45] értelmezni tudta a Nb H_{c2} -jének anizotrópiáját.

A Ginzburg egyenletek mikroszkopikus elméletből először Gorkov és Melik—Barkhudarov [16] által lettek levezetve, a Green függvényes formalizmus keretében anizotróp egységreszcse-spektrumot és $v(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ effektív elektron-elektron kölcsönhatást feltételezve.

A tömegtenzorra az

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{3}{2\varepsilon_F} \int v_{pi} v_{pj} \Phi^2(p_F, \hat{p}) \frac{d\sigma_F}{v_F} \left/ \int \frac{d\sigma_F}{v_F} \right. \quad (\text{IV. 1.3})$$

kifejezést kapták, ahol $\Phi(p_F, \hat{p})$ a gap-függvény impulzusfüggését jellemzi $T \lesssim T_c$ -nél, $v_{pi} = \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p_i}$ és $d\sigma_F$ felületelem a Fermi felületen. Látható, hogy $A \neq 0$ esetén felépő anizotrópia effektus nincs kötve a gap-függvény anizotrópiájához, ugyanis (IV. 1.3)-ból $v(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \text{konst.}$, $\Phi(\mathbf{p}) = \text{konst.}$ esetén is anizotróp tömegtenzort kapunk, melyet közvetlenül a v_{pi} sebességek anizotrópiája eredményez.

A továbbiakban egy a Gorkov és Melik—Barkhudarovénál általánosabb vizsgálatot fogunk végezni arra vonatkozólag, hogy az elektronspektrum anizotrópiája mellett a fonon-spektrum és az elektron-fonon mátrixelem anizotrópiája hogyan befolyásolja szupravezetők mágneses térbeli viselkedését. E célból szükségünk lesz a fononkicserélődésből származó, a kristály anizotrópia hatását is figyelembe vevő effektív elektron-elektron kölcsönhatás kifejezésére. Ennek származtatására a következő pontban térünk rá.

*

IV. 2. Effektív elektron-elektron kölcsönhatás származtatása az elektron-fonon kölcsönhatásból kiindulva, kristály anizotrópia figyelembevételével

Mielőtt az anizotróp szupravezetők mágneses térbeli viselkedésének vizsgálatára rátérnénk, le kell származtatnunk az elektron-fonon kölcsönhatásból kiindulva, egy fonon-kicserélődést figyelembe véve, az effektív elektron-elektron kölcsönhatást, kristály anizotrópia figyelembevételével.

Az elektron-fonon mátrixelem definíciója a következő [46]*

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) = -\sqrt{\frac{N_c}{2\omega_{q\lambda} M_c}} \langle \mathbf{p}' | \nabla_i U_i | \mathbf{p} \rangle \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{q\lambda}, \quad (\text{IV. 2.1})$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{K}^{**}$, λ a polarizációs index, $\omega_{q\lambda}$ a fonon-módus frekvenciája, N_c az egységnyi térfogatra eső egységcellák száma, M_c egy ion tömege, i az elektron helyzetét jellemző index, $U_i = U(\mathbf{r}_i)$ az elektron-ion kölcsönhatás potenciálja, $|p\rangle, |p'\rangle$ Bloch állapotfüggvények és $\boldsymbol{\varepsilon}_{q\lambda}$ a fonon polarizációs vektor. Ha a

$$|p\rangle = u_p(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}$$

alakú Bloch függvényekben $u_p(\mathbf{r})$ -t \mathbf{p} -től függetlennek tekintjük, ami a kristály-anizotropia elhanyagolását jelenti, akkor (IV. 2.1)-ből látható, hogy az elektron-fonon mátrixelem csak az impulzus különbségétől függ,

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) = g(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \lambda). \quad (\text{IV. 2.2})$$

Írjuk a $|p\rangle$ Bloch-függvényt a $w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ Wannier függvények szerint kifejtett alakba

$$|p\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_j} w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) \quad (\text{IV. 2.3})$$

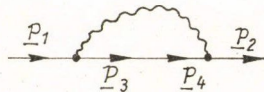
(IV. 2.3) behelyettesítésével (IV. 2.1) így írható

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) = -\sqrt{\frac{N_c}{2\omega_{q\lambda} M_c}} \sum_{jk} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_j} \cdot e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{R}_k} \boldsymbol{\varepsilon}_{q\lambda} \int w^*(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k) \nabla_i U_i w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}_i \quad (\text{IV. 2.4})$$

Most térjünk rá az effektív elektron-elektron kölcsönhatás meghatározására. Egy fonon kicserélődést veszünk figyelembe hasonlóan ahhoz, mint ahogy azt a III. 1. pontban tettük, de az elektron-fonon mátrixelem \mathbf{p} és \mathbf{p}' -től való függését illetően nem korlátozódunk a (IV. 2.2) alakra. Ekkor a Σ_1, Σ_2 sajátenergiás részek impulzusreprezentációban, Umklapp folyamatokat is figyelembe véve, a következőképpen írhatók fel***:

$$\Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -T \sum_{\omega'} \sum_{\substack{\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4 \\ \mathbf{q}, \mathbf{K}, \mathbf{K}'}} \sum_{\lambda} g(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3, \lambda) g(\mathbf{p}_4, \mathbf{p}_2, \lambda) \cdot$$

$$\cdot D_{\lambda}(i\omega - i\omega' \mathbf{q}) \delta_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3' \mathbf{q} + \mathbf{K}} \delta_{\mathbf{p}_4 - \mathbf{p}_2' - \mathbf{q} + \mathbf{K}'} G_{\omega'}(\mathbf{p}_3' \mathbf{p}_4)$$



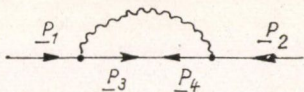
* A könnyebb áttekinthetőség kedvéért arra az egyszerű esetre szorítkozunk, amikor minden cellában csak egy-egy ion foglal helyet. Az általánosítás cellánként több ion esetére kézenfekvő.

** Adott \mathbf{p} és \mathbf{p}' esetén a \mathbf{K} reciprok rácsvektor olyan, hogy \mathbf{q} az első Brillouin zónába essen.

*** A Coulomb kölcsönhatásból származó részt most nem írtuk ki egyszerűség kedvéért; az is hasonlóan kezelhető, mint az elektron-fonon kölcsönhatásból származó rész.

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -T \sum_{\omega'} \sum_{\substack{\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4 \\ \mathbf{q}, \mathbf{K}, \mathbf{K}'}} \sum_{\lambda} g(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3, \lambda) g(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_4, \lambda) \cdot$$

$$\cdot D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) \delta_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3, \mathbf{q} + \mathbf{K}} \delta_{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_4, -\mathbf{q} + \mathbf{K}'} F_{\omega'}(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$$



Végezzünk el két összegzést a Kronecker δ -függvények segítségével, majd térjünk át a következő változókra:

$$1. \quad \Sigma_1 \text{ egyenletében: } \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2); \quad \mathbf{p}' = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4);$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2; \quad \mathbf{P}' = \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4,$$

$$2. \quad \Sigma_2 \text{ egyenletében: } \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2); \quad \mathbf{p}' = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4);$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2; \quad \mathbf{P}' = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4.$$

Ekkor Σ_1 és Σ_2 -re ugyanolyan jellegű egyenlet adódik, nevezetesen:

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_1(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{P}) \\ \Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{P}) \end{aligned} \right\} = -T \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{K}-\mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{K}+\mathbf{K}'} \sum_{\lambda} g\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \lambda\right) \cdot$$

$$\cdot g\left(\mathbf{p}' - \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \lambda\right) D_{\lambda}\left(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}' - \frac{1}{2}(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\right) \left\{ \begin{aligned} G_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}') \\ F_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}') \end{aligned} \right\}$$

A sajátenergiás részeket vegyes reprezentációba transzformáljuk:

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{K}-\mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{K}+\mathbf{K}'} \sum_{\lambda} \left[\int d\mathbf{R}' \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{P}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{K}')\mathbf{R}'} \cdot \right.$$

$$\cdot g\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \lambda\right) g^*\left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \lambda\right) \left. \right] \cdot$$

$$\cdot D_{\lambda}\left(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}' + \frac{1}{2}(\mathbf{K}' - \mathbf{K})\right) \cdot F_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{R}') \quad (\text{IV. 2.5})$$

és hasonló alakú Σ_1 egyenlete is, csak $F_{\omega'}$ helyett $G_{\omega'}$ írandó. Kihasználtuk, hogy $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) = g^*(\mathbf{p}', \mathbf{p}, \lambda)$. A

$$\bar{V}_{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R}', \mathbf{K} + \mathbf{K}') = \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{P}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{K}')\mathbf{R}'}$$

$$g\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \lambda\right) g^*\left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{K}-\mathbf{K}'), \lambda\right) \quad (\text{IV. 2.6})$$

jelöléssel (IV. 2.5) a

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{K}-\mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{K}+\mathbf{K}'} \sum_{\lambda} \int \bar{V}_{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}-\mathbf{R}', \mathbf{R}', \mathbf{K}+\mathbf{K}') \cdot D_{\lambda} \left(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}' + \frac{1}{2}(\mathbf{K}' - \mathbf{K}) \right) F_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{R}') d\mathbf{R}' \quad (\text{IV. 2.7})$$

alakot ölti.

A $\Sigma \bar{V}_{\lambda}$ D_{λ} effektív elektron-elektron kölcsönhatás az \mathbf{R}' változónak a rácsperiódus szerint periodikus függvénye. Minthogy a szupravezetők mágneses térbeli, kritikus hőmérséklet körüli viselkedése leírásánál szereplő karakterisztikus hosszúságok ξ_0 és ennél nagyobb nagyságrendűek, ezen rácsperiodikus változásra kiátlagolhatunk. Az átlagolás eredménye ekvivalens azzal, mintha a (IV. 2.7)-ben szereplő $\mathbf{K}+\mathbf{K}'$ -re történő összegezésben csak a $\mathbf{K}+\mathbf{K}' = 0$ tag szerepelne. A továbbiakban ezért csak a $\mathbf{K}+\mathbf{K}' = 0$ tagot tartjuk meg és kapjuk:

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{K}'} \sum_{\lambda} \int \bar{V}_{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}-\mathbf{R}') \cdot D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{K}') G_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{R}') d\mathbf{R}' \quad (\text{IV. 2.8})$$

D_{λ} -ban a $\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{K}' = \mathbf{q}$ vektor mindig az első Brillouin zónára korlátozódik. Gyakran egyszerűen csak $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ -t írunk D_{λ} argumentumába azzal a megállapodással, hogy ha $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ kívül esne az első Brillouin zónán, akkor a neki megfelelő redukált impulzust kell venni. Mi is ezt a konvenciót használtuk a III. fejezetben és használjuk a továbbiakban is.

Az effektív elektron-elektron kölcsönhatást a

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}-\mathbf{R}') &= \sum_{\lambda} \bar{V}_{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}-\mathbf{R}') D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) = \\ &= \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{P}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} g \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \lambda \right) \cdot \\ &\cdot g^* \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \lambda \right) D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (\text{IV. 2.9})$$

módon definiáljuk. Ha a fonon Green függvény ω -függése elhanyagolható, mely közelítés a retardációs effektusok elhanyagolásának felel meg, akkor (IV. 2.9) egy direkt kétrészecske kölcsönhatásba megy át.

Most helyettesítsük be $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda)$ (IV. 2.4) által megadott kifejezését a (IV. 2.9) képletbe.

$$\begin{aligned} g \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}\mathbf{P}, \lambda \right) g^* \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{P}, \lambda \right) &= \\ = \frac{N_c}{2\omega_{\mathbf{q}\lambda} M_c} \sum_{j'k'} e^{\frac{i}{2}\mathbf{P}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_{k'})} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} e^{-i\mathbf{p}'(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k'})} \cdot \\ \cdot \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}'_i w^*(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k) (\varepsilon_{\mathbf{q}\lambda} \nabla_i) U_i w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) w(\mathbf{r}'_i - \mathbf{R}_{k'}) (\varepsilon_{\mathbf{q}\lambda} \nabla_{i'}) U_{i'} w^*(\mathbf{r}'_i - \mathbf{R}_{j'}), \end{aligned}$$

így tehát explicit \mathbf{p} -függésre jutottunk és (IV. 2.9)-ben a \mathbf{P} -szerinti integrálást el tudjuk végezni a következő eredménnyel:

$$V_{\text{eff}}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}') = \sum_{\substack{j,k \\ j',k'}} I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \mathbf{R}_{j'} \mathbf{R}_{k'}) \cdot \\ \cdot \delta \left(\mathbf{R} - \mathbf{R}' + \frac{1}{2} (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_{k'}) \right) \quad (\text{IV. 2.10})$$

ahol

$$I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}' \mathbf{R}_j \dots \mathbf{R}_{k'}) = \sum_{\lambda} \frac{N_c}{2\omega_{q\lambda} M_c} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', q) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} e^{-i\mathbf{p}'(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k'})} \cdot \\ \cdot \int \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}'_i w^*(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k) (\epsilon_{q\lambda} \nabla_i) U_i w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) w(\mathbf{r}'_i - \mathbf{R}_{k'}) \cdot (\epsilon_{q\lambda} \nabla'_i) U'_i w^*(\mathbf{r}'_i - \mathbf{R}_{j'}) \quad (\text{IV. 2.11})$$

(IV. 2.10)-et, (IV. 2.9) figyelembevételével (IV. 2.8)-ba helyettesítjük és az \mathbf{R}' -re való integrálást egyszerűen elvégezhetjük. Az eredmény:

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \sum_{\substack{j,k \\ j',k'}} I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \mathbf{R}_{j'} \mathbf{R}_{k'}) \cdot \\ \cdot F_{\omega'} \left(\mathbf{p}', \mathbf{R} - \frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'}) \right) \quad (\text{IV. 2.12})$$

Mint hogy az F_{ω} Green függvényben szereplő \mathbf{R} függő mennyiségek ($\Sigma_2, \Sigma_1, A(\mathbf{R})$) a rácsvektornak megfelelő nagyságrendű távolságon igen lassan változnak, így $F_{\omega} \left(\mathbf{p}', \mathbf{R} - \frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'}) \right)$ \mathbf{R} körül sorba fejthető $\frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})$ hatványai szerint:

$$F_{\omega} \left(\mathbf{p}', \mathbf{R} - \frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'}) \right) = \\ = F_{\omega}(\mathbf{p}', \mathbf{R}) - \frac{\partial F_{\omega}(\mathbf{p}', \mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_{\mu}} \frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\mu} + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_{\omega}(\mathbf{p}', \mathbf{R})}{\partial R_{\mu} \partial R_{\nu}} \frac{1}{4} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\mu} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\nu} \quad (\text{IV. 2.13})$$

Definiáljuk a következő mennyiségeket:

$$V^{(0)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{\substack{j,k \\ j',k'}} I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \mathbf{R}_{j'} \mathbf{R}_{k'}) \quad (\text{IV. 2.14})$$

$$V_{\mu}^{(1)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') =$$

$$= - \sum_{\substack{j,k \\ j',k' \\ j-k+j'-k' \neq 0}} I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \mathbf{R}_{j'} \mathbf{R}_{k'}) \frac{1}{2} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\mu} \quad (\text{IV. 2.15})$$

$$V_{\mu\nu}^{(2)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{\substack{j,k \\ j',k' \\ j-k+j'-k' \neq 0}} I(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \mathbf{R}_{j'} \mathbf{R}_{k'}) \frac{1}{4} \cdot$$

$$\cdot (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\mu} (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{k'} - \mathbf{R}_{j'})_{\nu} \quad (\text{IV. 2.16})$$

Ezek segítségével (IV. 2.12) így írható:

$$\Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, R) = -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \left[V^{(0)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') F_{\omega'}(\mathbf{p}', R) + \right.$$

$$\left. + V_{\mu}^{(1)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial F_{\omega'}(\mathbf{p}', R)}{\partial R_{\mu}} + \frac{1}{2} V_{\mu\nu}^{(2)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial^2 F_{\omega'}(\mathbf{p}', R)}{\partial R_{\mu} \partial R_{\nu}} \right] \quad (\text{IV. 2.17})$$

Ezen egyenlet további vizsgálata a IV. 3. fejezetben történik, az F Green függvény közelítő meghatározása után.

Most térjünk vissza a $V_{\mu}^{(0)}$, $V_{\mu}^{(1)}$ és $V_{\mu\nu}^{(2)}$ mennyiségekhez és helyettesítsük be I (IV. 2.11)-ben megadott alakját.

(IV. 2.3) és (IV. 2.1) felhasználásával a következő eredményre jutunk ($|\mathbf{p} > = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}$)

$$V^{(0)} = \sum_{\lambda} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) |g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda)|^2 \quad (\text{IV. 2.18})$$

$$V_{\mu}^{(1)} = \frac{1}{2i} \sum_{\lambda} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) [-g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) +$$

$$+ g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda)] \quad (\text{IV. 2.19})$$

$$V_{\mu\nu}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\lambda} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) [-g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) (\nabla_{p_{\nu}} + \nabla_{p'_{\nu}}) \cdot$$

$$\cdot g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) - g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) (\nabla_{p_{\nu}} + \nabla_{p'_{\nu}}) \cdot$$

$$\cdot g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) + (\nabla_{p_{\nu}} + \nabla_{p'_{\nu}}) g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) \cdot$$

$$\cdot g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) + (\nabla_{p_{\mu}} + \nabla_{p'_{\mu}}) g^*(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda) (\nabla_{p_{\nu}} + \nabla_{p'_{\nu}}) g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda)]. \quad (\text{IV. 2.20})$$

Abban a speciális esetben, amikor a $|\mathbf{p} >$ Bloch függvényt síkhullámmal helyettesítjük (pl. zselé modellben), ami a rácsszerkezet, kristály anizotrópia elhanyagolását

jelenti, könnyen belátható módon a következő eredményre jutunk:

$$\begin{aligned}
 V_{\text{eff}}(i\omega - i\omega', \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}') &= I(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \quad (\text{IV. 2.21}) \\
 I(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}') &= \\
 &= \sum_{\lambda} \frac{N_c}{2\omega_{q\lambda} M_c} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) \cdot \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}'_i e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i)} (\epsilon_{q\lambda} \mathbf{V}_i) U_i(\epsilon_{q\lambda} \mathbf{V}_i) U'_i, \\
 V_{\mu}^{(1)} &= V_{\mu\nu}^{(2)} = \dots = 0, \\
 V^{(0)'} &= V^{(0)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}') = \sum_{\lambda} D_{\lambda}(i\omega - i\omega', \mathbf{q}) |\mathbf{g}_{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}|_{\lambda}^2, \\
 \Sigma_2(i\omega, \mathbf{p}, \mathbf{R}) &= -T \sum_{\omega'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V^{(0)}(i\omega - i\omega', \mathbf{p} - \mathbf{p}') F_{\omega'}(\mathbf{p}', \mathbf{R}).
 \end{aligned}$$

Tehát az effektív kölcsönhatásban a rácsszerkezet, kristály anizotropia figyelembevételének hatása egyrészt abban nyilvánul meg, hogy az effektív elektron-elektron kölcsönhatás a $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ különbségen kívül külön \mathbf{p} és \mathbf{p}' -től is függ, továbbá az $(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ -től való függés is eltérést mutat az egyszerű (IV. 2.21)-ben megadott $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ alaktól.

*

IV. 3. Anizotróp szupravezetők egyenletei külső mágneses térben

Ebben a pontban Werthamer [4] egyenleteinek anizotróp szupravezetőkre vonatkozó általánosítását vezetjük le [18]. Az egyszerűség kedvéért a retardációs effektusoktól most eltekintünk, ami jogosult, minthogy a legerősebb anizotróp szupravezető tulajdonságokat mutató anyagok nem erőcsatolásúak (mint az Sn) és azonkívül az ω -függés figyelembevétele a végeredmények lényegén nem változtat. Egy általános, direkt, kétrészecske kölcsönhatásból indulunk ki, melyet $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$ -gyel jelölünk, az előző pontban kapott konkrét alak alkalmazására a következő pontban kerül sor.

A rendszer Hamilton operátora a következő:

$$\begin{aligned}
 H &= \int \psi_{\alpha}^+(\mathbf{r}) \zeta \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\
 &+ \int V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \psi_{\alpha}^+(\mathbf{r}_1) \psi_{\beta}^+(\mathbf{r}_2) \psi_{\beta}(\mathbf{r}_3) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_4, \quad (\text{IV. 3.1})
 \end{aligned}$$

α és β spinindexek, az azonos indexekre összegezni kell. A V kölcsönhatás általában nem mértékinvariáns (csak a $V = \delta(r_1 - r_3) \delta(r_2 - r_4) V(r_1, r_2)$ esetben az); azonban mesterségesen mértékinvariánssá tehető a következő módon [17], [47], [48]

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) &\rightarrow V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4; \mathbf{A}) = \\
 &= V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \exp \left[\frac{ie}{c} \left(\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{r}_2}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \int_{\mathbf{r}_3}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}_4}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} d\mathbf{r} + 2 \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right) \right], \quad (\text{IV. 3.2})
 \end{aligned}$$

ahol $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$; $\mathbf{R}' = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4)$ és integrációs útként a két végpontot összekötő egyenest választjuk. Továbbá, a már az előző fejezetekben is használt

$$\bar{G}_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left[\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}_2}^{\mathbf{r}_1} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{IV. 3.3})$$

$$\bar{F}_\omega^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_\omega^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left[-\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}_2}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{IV. 3.4})$$

$$\bar{\Delta}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Delta^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left[-\frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \frac{ie}{c} \int_{\mathbf{r}_2}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \quad (\text{IV. 3.5})$$

propagátorokkal és gap-függvénnyel fogunk dolgozni, melyek biztosítják, hogy az eljárás minden lépésben mértékinvariáns legyen. Megjegyezzük, hogy a III. fejezetben a kölcsönhatás mértékinvariánssá tételének problémája nem merült fel, minthogy az ott használt kölcsönhatás, a $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = g(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ közelítés jogossága miatt, mértékinvariáns. A IV. 2. pontban tárgyalt elektron-phonon kölcsönhatásból származó effektív elektron-elektron kölcsönhatást azonban szükséges a (IV. 3.2) képlet értelmében mértékinvariáns alakká kiegészíteni.

Az F_ω és G_ω Green függvényekre vonatkozó egyenletek a (III. 1.1) és (III. 1.2) egyenletekből speciális esetként, a Σ_1, Σ_2 sajátenergiák frekvenciafüggésének elhagyásával adódnak. Továbbá, ha Σ_1 hatását a ξ egyrészesecske energiába beleolvastva képzeljük és áttérünk a $\Sigma_2(i\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Delta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ jelölésre, akkor a következő egyenletek kaphatók

$$\begin{aligned} \left[i\omega - \xi \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \right) + \mu \right] G_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \int \Delta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) F_\omega^+(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 \end{aligned} \quad (\text{IV. 3.6})$$

$$\left[-i\omega - \xi \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \right) + \mu \right] F_\omega^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int \Delta^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) G_\omega(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 \quad (\text{IV. 3.7})$$

ahol

$$\Delta^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -T \sum_{\omega} \int V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4; \mathbf{A}) F_\omega^+(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 \quad (\text{IV. 3.8})$$

(IV. 3.2), (IV. 3.4) és (IV. 3.5) felhasználásával (IV. 3.8)-ból adódik, hogy

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -T \sum_{\omega} \int V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \exp \left[\frac{2ie}{c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \cdot \\ \cdot \bar{F}_\omega^+(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4. \end{aligned} \quad (\text{IV. 3.9})$$

Érdekes a mértékinvarianciát biztosító exponenciális megjelenése a gap egyenletben.

Az eljárás további menete hasonló a III. fejezetben követetthez. Egyenleteinket, (IV. 3.6) és (IV. 3.7)-et, vegyes reprezentációba írjuk át:

$$i\omega G_{\omega}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) G_{\omega}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = 1 - \theta [\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{R}) F_{\omega}^{+}(\mathbf{p}, \mathbf{R})], \quad (\text{IV. 3.10})$$

$$-i\omega F_{\omega}^{+}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) - \theta \left[\varepsilon \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) F_{\omega}^{+}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \right] = \theta [\Delta^{*}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) G_{\omega}(\mathbf{p}, \mathbf{R})] \quad (\text{IV. 3.11})$$

ahol $\varepsilon(\mathbf{p}) = \zeta(\mathbf{p}) - \mu$ és θ a (II. 2.3)-ban megadott végtelen rendű differenciál-operátor. Feltesszük, hogy $A(\mathbf{R})$ és $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{R})$ \mathbf{R} -nek lassan változó függvényei és így a kváziklasszikus közelítés használható, valamint azt is, hogy A maga is kicsiny; Δ kicsiségére vonatkozóan azonban a III. fejezettel ellentétben, nem teszünk megszorítást.* A (IV. 3.10), (IV. 3.11) egyenletekben G_{ω} , F_{ω}^{+} , ε és θ -t a feltételezett kis mennyiségek szerint másodrendig kifejtjük és meghatározzuk F_{ω}^{+} és G_{ω} közelítő kifejezéseit, amelyekből (II. 2.7) és (II. 2.8) segítségével \bar{F}_{ω}^{+} és \bar{G}_{ω} kapható hasonló rendig. Ezen Green-függvényeket a gap-egyenletbe és az áram egyenletébe behelyettesítve a következő eredményre jutunk:

$$\bar{\Delta}^{*}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{R}' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}') \exp \left[-\frac{2ie}{c} \int_{\mathbf{R}'}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \cdot [\bar{F}_{\omega}^{+(0)}(\mathbf{p}', \mathbf{R}') + \bar{F}_{\omega}^{+(1)}(\mathbf{p}', \mathbf{R}') + \bar{F}_{\omega}^{+(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{R}')], \quad (\text{IV. 3.12})$$

$$\mathbf{j}_i(\mathbf{R}) = 2eT \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} v_{p_i} [\bar{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) + \bar{G}_{\omega}^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) + \bar{G}_{\omega}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{R})], \quad (\text{IV. 3.13})$$

ahol a $\bar{G}_{\omega}^{(0)}$, $\bar{G}_{\omega}^{(1)}$, $\bar{G}_{\omega}^{(2)}$ és $\bar{F}_{\omega}^{+(0)}$, $\bar{F}_{\omega}^{+(1)}$, $\bar{F}_{\omega}^{+(2)}$ függvények kifejezéseit terjedelmes voltuk miatt itt nem adjuk meg, megtalálhatók a szerző [18] cikkének Appendixében.

(IV. 3.12) és (IV. 3.13) $\bar{\Delta}(\mathbf{p}, \mathbf{R})$ -re és $A(\mathbf{R})$ -re vonatkozó csatolt integro-differenciál egyenletrendszer. (IV. 3.12)-ben $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}')$ $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$ vegyes reprezentáció-beli alakja. Ezen egyenletek London típusú anizotróp szupravezetők viselkedésének véges hőmérsékleten való leírására alkalmasak. (Az, hogy az egyenletek csak London-típusú szupravezetőkre érvényesek, nyilvánvaló a $\Delta(\mathbf{R})$ és $A(\mathbf{R})$ -re tett lokalitási megszorításból.) A (IV. 3.12) és (IV. 3.13) egyenletek Werthamer [4] (II. 2. 11) és (II. 2.12) képletekkel megadott egyenletei általánosításának tekinthetők anizotróp esetre, azonban azoknál több szempontból komplikáltabbak. Egyrészt Δ \mathbf{R} -en kívül most \mathbf{p} -től is függ és az egyenletek általában integro-differenciálegyenletek a Werthamer-féle differenciálegyenletek helyett. Továbbá sokkal több tagot is tartalmaznak. Bizonyos egyszerűsíthető feltevésekkel élve a kölcsönhatást illetően az egyenletek is bizonyos mértékig egyszerűbbé válnak. (Legextrémebb esetben pl. $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}')$ -t a Gorkov-féle kölcsönhatással helyettesítjük, amikor $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \rightarrow \Delta(\mathbf{R})$ és az elektron spektrum anizotrópiáját csak a Green függvényekben, $\varepsilon(\mathbf{p})$, v_{p_i} és w_{ij} -n keresztül vesszük figyelembe. Ekkor ugyanannyi tag marad, mint Werthamer egyenleteiben, és az \mathbf{R} -ben való nemlokalitás is megszűnik.)

* Feltevéseink ugyanazok, mint Werthamer dolgozatában. A jelen tárgyalás általánosabb, mert megengedtük az elektron-spektrum anizotrópiáját és Gorkov-kölcsönhatás helyett általános, mértékinvariáns direkt kölcsönhatással számolunk.

Minthogy ezen egyenletek megoldása reménytelennek látszik, nem foglalkozunk tovább velük. A következő pontban a $T \lesssim T_c$ hőmérséklettartományra szorítkozunk, amikor az egyenletek rendkívüli mértékben leegyszerűsödnek.

*

IV. 4. Anizotróp szupravezetők egyenletei mágneses tér jelenlétében $T \lesssim T_c$ esetén

Ebben a pontban, a kritikus hőmérséklethez közeli hőmérsékletre szorítkozva, azt vizsgáljuk meg, hogy milyen hatást gyakorol szupravezetők mágneses térbeli viselkedésére az elektron-spektrum, fononspektrum és elektron-fonon kölcsönhatási mátrixelem anizotrópiája.

Az előző fejezetben talált eredmények lényegesen leegyszerűsödnek, minthogy jogosult a Green-függvényeket $|\Delta|$ -szerint is kifejteni. A kifejtés hasonló rendig történik, mint ahogy azt a III. 2. pontban tettük. Így a [18] Appendixében megadott Green-függvények a következő kifejezéseké egyszerűsödnek ($[\]_0 \equiv \omega^2 + \varepsilon^2$):

$$\bar{G}_\omega^{(0)} = -\frac{i\omega + \varepsilon}{[\]_0} + \frac{i\omega + \varepsilon}{[\]_0^2} |\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{R})|^2 \quad (\text{IV. 4.1.})$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_\omega^{(1)} = & -\frac{i}{2[\]_0^2} [\Delta^* v_{p_i} O_i \Delta - \Delta v_{p_i} O_i^* \Delta^*] + \\ & + \frac{i}{2} \frac{i\omega + \varepsilon}{[\]_0^2} \cdot [\nabla_{p_i} \Delta^* O_i \Delta - \nabla_{p_i} \Delta O_i^* \Delta^*] \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.2})$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_\omega^{(2)} = & -\frac{w_{ij}}{8[\]_0^2} \nabla_{R_i} \nabla_{R_j} |\Delta|^2 \left(1 - \frac{4\varepsilon(i\omega + \varepsilon)}{\omega^2 + \varepsilon^2} \right) - \frac{w_{ij}}{2[\]_0^2} \cdot O_i^* \Delta^* O_j^* \Delta + \\ & + \frac{i\omega + \varepsilon}{2[\]_0^2} \left(1 - \frac{2\varepsilon^2}{[\]_0} \right) v_{p_i} v_{p_j} \nabla_{R_i} \nabla_{R_j} |\Delta|^2 + \frac{v_{p_i} v_{p_j} O_i \Delta O_j^* \Delta^*}{[\]_0^2 (i\omega + \varepsilon)} + \\ & + \frac{1}{4[\]_0^2} \nabla_{p_i} \Delta^* v_{p_j} O_i O_j \Delta - \frac{1}{4[\]_0^2} v_{p_j} v_{p_i} O_j \Delta O_i^* \Delta^* + \\ & + \frac{1}{4[\]_0^2} \nabla_{p_i} \Delta v_{p_j} O_i^* O_j^* \Delta^* - \frac{1}{4[\]_0^2} v_{p_j} \nabla_{p_i} O_j^* \Delta^* O_i \Delta + \\ & + \frac{i\omega + \varepsilon}{8[\]_0^2} [O_i^* O_j^* \Delta^* \nabla_{p_i} \nabla_{p_j} \Delta + O_i O_j \Delta \nabla_{p_i} \nabla_{p_j} \Delta^* - 2 \nabla_{p_i} O_j \Delta \nabla_{p_j} O_i \Delta^*] \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.3})$$

$$\bar{F}_\omega^{+(0)} = \frac{\Delta^*}{[\]_0} - \frac{\Delta^* |\Delta|^2}{[\]_0^2} \quad (\text{IV. 4.4})$$

$$\bar{F}_\omega^{+(1)} = \frac{\omega}{[\]_0^2} v_{p_i} O_i^* \Delta^* \quad (\text{IV. 4.5})$$

$$\bar{F}_\omega^{+(2)} = \frac{\varepsilon}{4[\frac{3}{10}]^2} w_{ij} O_i^* O_j^* \Delta^* + v_{p_i} v_{p_j} O_i^* O_j^* \Delta^* \cdot \left[\frac{3}{4[\frac{3}{10}]^2} - \frac{\varepsilon^2}{[\frac{3}{10}]^2} \right] - \frac{2ie}{c} \frac{\varepsilon}{4[\frac{3}{10}]^2} \nabla_{p_i} \Delta^* v_{p_j} \cdot \left[\frac{\partial A_j}{\partial R_i} - \frac{\partial A_i}{\partial R_j} \right] \quad (\text{IV. 4.6})$$

Helyettesítsük be ezen közelítő Green-függvény kifejezéseket a

$$\Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = -T \sum_\omega \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{R}' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}') \cdot \exp \left[-\frac{2ie}{c} \int_{\mathbf{R}'}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \bar{F}_\omega^+(\mathbf{p}', \mathbf{R}')$$

és

$$j_i(\mathbf{R}) = 2eT \sum_\omega \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} v_{p_i} \bar{G}_\omega(\mathbf{p}, \mathbf{R})$$

képletekbe és vegyük figyelembe, hogy $\bar{F}_\omega^{+(1)}$ ω -ban páratlan lévén nem ad járulékot a gap-egyenlethez. Továbbá, minthogy $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Delta(\varepsilon, \hat{p}, \mathbf{R})$ ($\hat{p} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$) ε páros függvényének választható, a \mathbf{p}' szerinti integrál átírható ε' és \hat{p}' szerinti integrállá és az ε' szerinti integrálás $-\omega_D$ -tól ω_D -ig terjedő szimmetrikus tartományra történik, $\bar{F}_\omega^{+(2)}$ -ből az ε -ban páratlan tagok is eltűnő járulékot adnak a gap-egyenlethez.

Ami az áramot illeti, könnyen belátható módon szimmetria okoknál fogva csak $G_\omega^{(1)}$ jön számításba. Így a következő eredményre jutunk:

$$j_i(\mathbf{R}) = -ieT \sum_\omega \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{v_{p_i} v_{p_j}}{(\omega^2 + \varepsilon^2)^2} \cdot \left[\Delta^* \frac{\partial \Delta}{\partial R_j} - \Delta \frac{\partial \Delta^*}{\partial R_j} - \frac{4ie}{c} A_j(\mathbf{R}) |\Delta|^2 \right] \quad (\text{IV. 4.7})$$

$$\begin{aligned} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -T \sum_\omega \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{R}' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}') \cdot \\ & \cdot \exp \left[-\frac{2ie}{c} \int_{\mathbf{R}'}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right] \cdot \left[\frac{\Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R}')}{\omega^2 + \varepsilon'^2} - \frac{|\Delta(\mathbf{p}', \mathbf{R}')|^2 \Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R}')}{(\omega^2 + \varepsilon'^2)^2} + \right. \\ & \left. + v_{p_i} v_{p_j} O_{R_i}^* O_{R_j}^* \Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R}') \cdot \left(\frac{3}{4(\omega^2 + \varepsilon'^2)^2} - \frac{\varepsilon'^2}{(\omega^2 + \varepsilon'^2)^3} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.8})$$

A kapott egyenletrendszer hasonló típusú tagokat tartalmaz, mint a Ginzburg–Landau egyenletrendszer, viszont Δ \mathbf{R} mellett \mathbf{p} -től is függ és a gap-egyenlet mind \mathbf{R} -ben, mind \mathbf{p} -ben nemlokális.

$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}')$ alakját mindeddig nem specializáltuk; most használjuk ki a IV. 2. pontban talált eredményt az egy-fonon kicserélődéséből származó effektív elektron-elektron kölcsönhatást illetően. (IV. 2.10)-ben a frekvenciafüggést elhanyagolva kapjuk:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}, \mathbf{R}') = & \sum_{\substack{j,k \\ j',k'}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R}_j, \mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{j'}, \mathbf{R}_{k'}) \cdot \\ & \cdot \delta \left(\mathbf{R} - \mathbf{R}' + \frac{1}{2} (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_{k'}) \right) \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.9})$$

ahol I a (IV. 2.11)-gyel megadott, elektron-fonon kölcsönhatásból származó részt és a Coulomb kölcsönhatást tartalmazza. Helyettesítsük (IV. 4.9)-et (IV. 4.8)-ba, végezzük el az \mathbf{R}' szerinti integrálást és a szögletes zárójelben levő kifejezést, valamint az

$$\exp \left[-\frac{2ie}{c} \int_{\mathbf{R} + \frac{1}{2}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_{k'})}^{\mathbf{R}} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right]$$

faktort fejtsük ki \mathbf{R} -körül $\frac{1}{2}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_{k'})$ hatványai szerint a (IV. 2.13) minta alapján. A különféle mennyiségek kicsiségére tett korábbi feltevéseinknek megfelelően csak a szögletes zárójel első tagjában szereplő Δ -nak a deriváltjai adnak el nem hanyagolható járulékot, a mértékinvarianciát biztosító (a vektor potenciált tartalmazó) tagokkal együtt, melyek az exponenciális kifejtéséből származnak. Δ első deriváltját tartalmazó tag végtelen rendszer esetén szimmetriaokokból el kell tűnjön és így kapjuk:

$$\begin{aligned} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = & -T \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \left\{ V^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \left[\frac{\Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R})}{\omega^2 + \varepsilon'^2} - \right. \right. \\ & - \frac{\Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R}) |\Delta(\mathbf{p}', \mathbf{R})|^2}{(\omega^2 + \varepsilon'^2)^2} + \frac{v_{p\mu} v_{p\nu}}{2(\omega^2 + \varepsilon'^2)^2} \cdot O_{R\mu}^* O_{R\nu}^* \Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R}) \left. \right] + \\ & \left. + \frac{1}{2} V_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \cdot \frac{O_{R\mu}^* O_{R\nu}^* \Delta^*(\mathbf{p}', \mathbf{R})}{\omega^2 + \varepsilon'^2} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.10})$$

ahol

$$V^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{\lambda} D_{\lambda}(0, \mathbf{q}) |g(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda)|^2 + V_c(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$$

és $V_{\mu\nu}^{(2)}$ (IV. 2.16)-tal van megadva.

Mínthogy az \mathbf{R}' -ben való nemlokalitás megszűnt, remélhetjük, hogy Ginzburg—Landau-típusú egyenletekre juthatunk. E célból fejtsünk ki, a III. 2. pontban már részletezett módon, $[(T_c - T)/T_c]^{1/2}$ hatványai szerint. Azt találjuk, hogy Δ kifejtésének legalacsonyabb rendű, $[(T_c - T)/T_c]^{1/2}$ -es tagja

$$\Delta^{*(1/2)}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{p}) \Delta_1^*(\mathbf{R}) \quad (\text{IV. 4.11})$$

alakú, ahol $\Phi(\mathbf{p})$ -t a

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}) = & -T_c \sum_{\omega_c} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\Phi(\mathbf{p}')}{\omega^2 + \varepsilon'^2} = \\ = & -\frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\Phi(\mathbf{p}')}{\varepsilon'} \tanh \frac{\varepsilon'}{2T_c} \end{aligned} \quad (\text{IV. 4.12})$$

egyenlet határozza meg. A $\Delta_1^*(\mathbf{R})$ -re vonatkozó egyenletet is a III. 2. pontban leírt módon kaphatjuk meg a $\Delta^{*(3/2)}$ -re vonatkozó egyenlet megoldhatósági feltételéből. Az eredmény:

$$\frac{C}{2m_{\mu\nu}} O_{R\mu}^* O_{R\nu}^* \Delta_1^*(\mathbf{R}) + \left[a \frac{T_c - T}{T_c} - b |\Delta_1(\mathbf{R})|^2 \right] \Delta_1^*(\mathbf{R}) = 0,$$

ahol

$$\frac{1}{\bar{m}_{\mu\nu}} = \frac{1}{m_{\mu\nu}} + \frac{1}{C} T_c \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} V_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \cdot \frac{\Phi(\mathbf{p})\Phi(\mathbf{p}')}{\varepsilon(\omega^2 + \varepsilon'^2)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T_c}, \quad (\text{IV. 4.13})$$

$$\frac{1}{m_{\mu\nu}} = \frac{1}{C} T_c \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{v_{F\mu} v_{F\nu}}{(\omega^2 + \varepsilon^2)^2} \Phi^2(\mathbf{p}), \quad (\text{IV. 4.14})$$

$$b = T_c \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Phi^4(\mathbf{p})}{(\omega^2 + \varepsilon^2)^2}; \quad a = \frac{1}{4T_c} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Phi^2(\mathbf{p})}{\operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T_c)}$$

(IV. 4.11)-gyel az áram kifejezése a

$$j_{\mu}(\mathbf{R}) = C \left[-\frac{ie}{m_{\mu\nu}} \left(\Delta_1^* \frac{\partial \Delta_1}{\partial R_{\nu}} - \Delta_1 \frac{\partial \Delta_1^*}{\partial R_{\nu}} \right) - \frac{4e^2}{m_{\mu\nu} c} A_{\nu}(\mathbf{R}) |\Delta_1|^2 \right]$$

alakot ölti, ahol C tetszőleges állandó, az egyenletből kiesik. A rendparamétert a

$$\psi(\mathbf{R}) = \sqrt{C} \Delta(\mathbf{R})$$

definícióval bevezetve, az

$$\frac{1}{2\bar{m}_{\mu\nu}} O_{R_{\mu}}^* O_{R_{\nu}}^* \psi^*(\mathbf{R}) + \left[\bar{\alpha}'_c \frac{T_c - T}{T_c} - \bar{\beta}_c |\psi|^2 \right] \psi^* = 0$$

$$j_{\mu}(\mathbf{R}) = -\frac{ie}{m_{\mu\nu}} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial R_{\nu}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial R_{\nu}} \right) - \frac{4e^2}{m_{\mu\nu} c} A_{\nu} |\psi|^2$$

egyenletekhez jutunk, ahol $\bar{\alpha}'_c = a/C$, $\bar{\beta}_c = b/C^2$. Most válasszuk meg C -t a következő módon:

$$C = m T_c \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{3m^2} \frac{\Phi^2(p)}{(\omega^2 + \varepsilon^2)^2}.$$

Ennek szükségessége abból a követelményből adódik, hogy a Ginzburg—Landau egyenleteket szokásos alakjukban kapjuk vissza, ha a tömegtenzorok skalárrá egyszerűsödnek. Ez azt jelenti, hogy ennek a skalárnak mindkét egyenletben az elektron tömeggel kell megegyeznie. C választása biztosítja ezt az áram egyenletében; a gap-egyenletet még végig kell szoroznunk \bar{m}/m -mel, ahol \bar{m} $\bar{m}_{\mu\nu}$ közös diagonális elemeit jelöli abban a speciális esetben, amikor $\varepsilon(p) = p^2/2m - \mu$, de $\Phi(p)$, valamint $V^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ nem-zérus diagonális elemei még $|p|$, $|p'|$ -től függhetnek:

$$\bar{m}^{-1} = m^{-1} + \frac{1}{C} T_c \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} V^{(2)}(|\mathbf{p}|, |\mathbf{p}'|) \cdot \frac{\Phi(p)}{\varepsilon} \frac{\Phi(p')}{\omega^2 + \varepsilon'^2} \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T_c}$$

Így kapjuk, hogy

$$\frac{1}{2\bar{m}_{\mu\nu}} O_{R_{\mu}}^* O_{R_{\nu}}^* \psi^*(\mathbf{R}) + \left[\alpha'_c \frac{T_c - T}{T_c} - \beta_c |\psi|^2 \right] \psi^* = 0 \quad (\text{IV. 4.15})$$

$$j_{\mu}(\mathbf{R}) = -\frac{ie}{m_{\mu\nu}} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial R_{\nu}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial R_{\nu}} \right) - \frac{4e^2}{m_{\mu\nu} c} A_{\nu} |\psi|^2, \quad (\text{IV. 4.16})$$

ahol

$$\frac{1}{\bar{m}_{\mu\nu}} = \frac{\bar{m}}{m} \frac{1}{\bar{m}_{\mu\nu}}; \quad \alpha'_c = \bar{\alpha}'_c \frac{\bar{m}}{m}, \quad \beta_c = \bar{\beta}_c \frac{\bar{m}}{m}.$$

A (IV. 4.15), (IV. 4.16) egyenletek a fenomenologikus (I. 23), (I. 24) Ginzburg egyenletek általánosításának tekinthetők. Egyenleteink általánosabb volta abban áll, hogy a két egyenletben szereplő tömegtenzorok különböznek, ami a $V_{\mu\nu}^{(2)}$ kölcsönhatás figyelembevételének a következménye.

Gorkov és Melik-Barkhudarov [16] eredményét, akik a Ginzburg egyenletek mikroszkopikus származtatását adták, abban a speciális esetben kapjuk vissza, ha $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}') = V(\hat{p}, \hat{p}') \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = V(\hat{p}, \hat{p}') \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ alakú kölcsönhatásra szorítkozunk ($\hat{p} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$), amikor $\Phi(\mathbf{p}) = \Phi(\hat{p})$, $V_{\mu\nu}^{(2)} = 0$ és $\tilde{m}_{\mu\nu} = m_{\mu\nu}$. Megjegyezzük, hogy Gorkov és Melik-Barkhudarov a kölcsönhatásra konkrét formát nem adtak meg.

A kapott eredményeink alapján vizsgáljuk most meg, hogy a különféle anizotrópia-források (melyek azonban mind a kristály anizotrópiából származnak) hogyan jutnak érvényre szupravezetők mágneses térbeli viselkedésében a kritikus hőmérséklet közelében.

1. A *fononspektrum* anizotrópiája csak a $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}')$ kölcsönhatáson keresztül nyilatkozik meg. Az elektron állapotok anizotrópiáját elhanyagolva, de a fononspektrumét nem, egy $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}') = V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ alakú kölcsönhatást kapunk. Következésképpen $\tilde{m}_{\mu\nu} = m_{\mu\nu}$ ebben az esetben és az elektron-spektrum anizotrópiájának elhanyagolása miatt $m_{\mu\nu}$ skalár, tehát a Ginzburg—Landau egyenletek érvényesek T_c közelében.

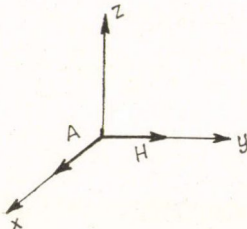
2. Az *elektronspektrum* anizotrópiája közvetlenül azt okozza, hogy a skalár tömeg helyett tömegtenzor kerül a Ginzburg—Landau egyenletekbe: $m \rightarrow m_{\mu\nu}$.

3. A kristály anizotrópia az *elektronok közötti kölcsönhatásban* szereplő Bloch elektron állapot-függvényeken keresztül is megnyilvánul és a $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{R} - \mathbf{R}')$ effektív elektron-elektron kölcsönhatásban egyrészt azt okozza, hogy az nem csak a $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ különbségtől, hanem \mathbf{p} és \mathbf{p}' -től külön is függ, másrészt az $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ -től való függése is eltér a $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ -szerű függéstől. Az utóbbi körülmény a szupravezetők mágneses térbeli viselkedését $T \lesssim T_c$ esetén leíró egyenletekben a kétfajta tömegtenzor felépítéséhez vezet

$$m \rightarrow \begin{matrix} m_{\mu\nu} \\ \tilde{m}_{\mu\nu} \end{matrix},$$

és ezen felül a Ginzburg—Landau—Gorkov elmélet paramétereinek az értékét is módosítja (az \bar{m} szorzó révén). A kölcsönhatás impulzusfüggése a paraméterek további módosulását okozza a $\Phi(\mathbf{p})$ függvényen keresztül.

A (IV. 4.15), (IV. 4.16) egyenleteket közös főtengety-rendszerre transzformálhatjuk, hiszen mind $m_{\mu\nu}$ mind $\tilde{m}_{\mu\nu}$ tenzorszerkezetét csak a kristály struktúra határozhatja meg. A koordinátarendszert így megválasztva és y irányú külső mágneses teret feltételezve definiáljuk. Ginzburg nyomán [15], a λ_x, λ_z behatolási mélységeket (vö. (I. 11))



5. ábra

$$\lambda_x = \frac{c}{2e} \sqrt{\frac{m_x}{4\pi |\psi_0|^2}} \quad (\text{IV. 4.17})$$

$$\lambda_z = \frac{c}{2e} \sqrt{\frac{m_z}{4\pi |\psi_0|^2}}$$

A (IV. 4.15) egyenlet linearizált alakjában a következő lesz:

$$\frac{1}{2\tilde{m}_z} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial z^2} - \frac{4e^2}{c} \frac{1}{2\tilde{m}_x} A^2 \psi^* + \alpha'_c \frac{T_c - T}{T_c} \psi^* = 0,$$

ahonnan a felső kritikus mágneses térre a

$$\tilde{H}_{c_2} = \frac{c|\alpha|}{e} (\tilde{m}_z \tilde{m}_x)^{1/2} \quad (\text{IV. 4.18})$$

összefüggés következik $\left(\alpha = -\alpha'_c \frac{T_c - T}{T_c} \right)$. Az $\tilde{m}_i^{-1} = m_i^{-1} + \delta m_i^{-1}$ jelöléssel ($i = x, z$), kis δm_i^{-1} esetén (IV. 4.18) így írható

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{c_2} &= \frac{c|\alpha|}{e} \left[\frac{m_x m_z}{\left(1 + m_x \delta \frac{1}{m_x}\right) \left(1 + m_z \delta \frac{1}{m_z}\right)} \right]^{1/2} = \\ &= \frac{4e}{c} \lambda_x \lambda_z H_c^2 \left[1 - \frac{2e^2}{c^2} 4\pi |\psi_0|^2 \cdot \left(\lambda_x^2 \delta \frac{1}{m_x} + \lambda_z^2 \delta \frac{1}{m_z} \right) \right], \end{aligned}$$

ahol kihasználtuk a (IV. 4.17) és (I. 7) képleteket. Ez az összefüggés lép (IV. 1.2) helyébe. A felső kritikus mágneses tér, valamint a behatolási mélységek méréséből felvilágosítást kaphatunk a tömegtenzor $\delta \frac{1}{m_i}$ anizotróp-jellegű járulékára és így közvetve az effektív elektron-elektron kölcsönhatás anizotrópiájára.

*

Köszönetnyilvánítás

Ezúton mondok köszönetet Pál Lénárd akadémiai levelező tagnak munkám iránt tanúsított érdeklődéséért valamint Hargitai Csabának, Szépfalusi Péternek, Vasvári Bélának és Zawadowski Alfrédnek hasznos diszkusszióért és értékes tanácsokért.

FÜGGELÉK

A Ginzburg—Landau elmélet érvényességéről a kritikus pont közelében

Az I. fejezetben ismertettük a fenomenologikus Ginzburg—Landau elméletet. Az (I. 1)—(I. 2) szabadenergia funkcionálból kiindulva egyenleteket nyertünk a rendparaméter és vektorpotenciál legvalószínűbb, egyensúlyi értékének meghatározására. Ginzburg és Landau nyomán hallgatólag feltettük, hogy az egyensúlyi érték körüli fluktuációk kicsik és így elhanyagolhatók, azaz a legvalószínűbb érték egyben az átlagértéket is adja. Ismeretes azonban, hogy a rendparaméter fluktuációi T_c -hez közeledve nőnek és végtelen nagyokká válnak a kritikus pontban. Kérdés, hogy T_c -hez mennyire közel áll be az a helyzet, amikor a Ginzburg—Landau elmélet

emiatt alkalmazhatatlanná kezd válni. Ginzburg [49] ezen probléma vizsgálatára magát a Ginzburg—Landau elméletet használta fel, feltételezve, hogy a rendparaméter a fluktuációk során is valós marad.

A Függelékben megvizsgáljuk a rendparaméter fluktuációit Ginzburg gondolatmenetét általánosítva: figyelembe vesszük a rendparaméter fázisának fluktuációit is. Ezt az általánosabb diszkussziót indokolja, hogy amint arra az utóbbi időben fény derült, pl. a szuprafolyékony Helium λ -fázisátmenetében a fázisfluktuációknak döntő szerepük van [50], [51], [52].

Az elmélet érvényességének feltétele az, hogy a rendparaméter fluktuációi kicsik legyenek a rendparaméter egyensúlyi értékéhez képest. A fluktuációk egy része elesik, ha a rendparamétert egy megfelelő térrészre kiátlagoljuk. Az elmélet lokális jellegének elrontása nélkül azonban legfeljebb koherencia hossznyira átlagolhatunk ki [53].

Így tehát a feltétel a

$$\langle (\psi(\mathbf{r}) - \langle \psi \rangle)(\psi^*(\mathbf{r}') - \langle \psi^* \rangle) \rangle_T \big|_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \xi} \ll \langle \psi \rangle^2 \quad (\text{F. 1})$$

alakú lesz. ξ az I. fejezetben bevezetett koherencia hossz. A hőmérsékleti átlagérték a statisztikus mechanika szabálya szerint a következőképpen számítható ki:

$$\begin{aligned} & \langle (\psi(\mathbf{r}) - \langle \psi \rangle)(\psi^*(\mathbf{r}') - \langle \psi^* \rangle) \rangle_T \propto \int D\psi(\mathbf{r}) (\psi(\mathbf{r}) - \langle \psi \rangle)(\psi^*(\mathbf{r}') - \langle \psi^* \rangle) \cdot \\ & \cdot \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (F[\psi(\mathbf{r})] - F_0) \right], \end{aligned} \quad (\text{F. 2})$$

ahol $D\psi(\mathbf{r})$ minden lehetséges ψ -függvény szerinti funkcionál integrálást jelöl, F a szabadenergia, melyre az (I. 1), (I. 2)-ben megadott közelítő kifejezést használjuk $H=0$ -t írva, F_0 a szabadenergia egyensúlyi értéke, A $\langle \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}') \rangle_T$ termodinamikai átlag számítását megtalálhatjuk Rice [54] cikkében, aki az egy- és kétdimenziós szupravezetés lehetőségét vizsgálta a Ginzburg—Landau elmélet alapján. Eredménye a következő:

$$\langle \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}') \rangle_T \propto \psi_0^2 \left[1 + \frac{\pi}{2\gamma |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{\xi}} \right] e^{-\frac{1}{\gamma} \left(Q - \frac{\pi}{2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right)} \quad (\text{F. 3})$$

ahol ψ_0^2 (I. 3)-mal van megadva, $\gamma = 4\pi^2\psi_0^2\delta/k_B T_c$ és Q levágási impulzus, melynek bevezetése a Ginzburg—Landau szabadenergia-kifejezés közelítő volta miatt vált szükségessé: $\nabla\psi$ másodiknál magasabb hatványainak elhanyagolása $\sum_k \frac{1}{k^2}$ típusú divergencia felléptéhez vezet.

Az (F. 1) feltétel kiértékeléséhez még $\langle \psi \rangle_T$ kiszámítására van szükségünk:

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle_T \propto \int D\psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (F[\psi(\mathbf{r})] - F_0) \right]. \quad (\text{F. 4})$$

$\psi(\mathbf{r})$ -t a $\psi(\mathbf{r}) = (\psi_0 + \tilde{\psi}(\mathbf{r}))e^{i\varphi(\mathbf{r})}$ alakba írjuk és $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$, $\nabla\varphi(\mathbf{r})$ és $\nabla\tilde{\psi}(\mathbf{r})$ -ben másodrendig tartva meg tagokat, (I. 1), (I. 2)-ből (I. 3)-at felhasználva kapjuk:

$$F[\psi(\mathbf{r})] - F_0 = -2\alpha \int (\tilde{\psi}(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r} + \delta \int (\nabla\tilde{\psi}(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r} + \delta\psi_0^2 \int (\nabla\varphi(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r} \quad (\text{F. 5})$$

(F. 5)-öt (F. 4)-be írjuk, figyelembe vesszük, hogy $\langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}) \rangle_T = 0$ és a fázis szerint integrálást a $\varphi(\mathbf{r}) = \sum_k \varphi_k \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$ Fourier sorfejtés után végezzük el $\varphi_k = \Phi_k + i\chi_k$ -t írva. Kapjuk, hogy

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle_T \alpha \psi_0 \int D\Phi_k D\chi_k \exp \left[i \sum_k (\Phi_k \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \chi_k \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \right] \cdot \\ \cdot \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \delta \psi_0^2 \cdot \Omega \sum_k k^2 (\Phi_k^2 + \chi_k^2) \right],$$

ahol Ω a rendszer térfogata. Az integrálás egyszerűen elvégezhető és kapjuk:*

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle_T \alpha \psi_0 e^{-\frac{Q}{2\gamma}} \quad (\text{F. 6})$$

(F. 3)-at és (F. 6)-ot (F. 1)-be behelyettesítve, mely a

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') \rangle \ll 2 \langle \psi \rangle^2, \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \xi \quad (\text{F. 7})$$

egyszerűbb alakra írható, az

$$e^z \left(1 + \frac{z}{e} \right) \ll 2 \quad (\text{F. 8})$$

eredményre jutunk, ahol $z = \pi/2 \gamma \xi$. Azonnal látszik, hogy a feltétel csak $z \ll 1$ esetén teljesülhet, amikor is az exponenciális sorba fejthető. Felhasználjuk, hogy

$$\psi_0^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = \frac{N}{2} \frac{T_c - T}{T_c}$$

(lásd (II. 1.9)),

$$N = k_F^3 / 6\pi^2, \quad \gamma = \frac{\varepsilon_F}{k_B T_c} \frac{k_F}{3} \frac{T_c - T}{T_c},$$

$$\xi = \xi_0 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1/2}$$

és nagyságrendi becslésre a következő értékeket vesszük fel:

$$k_B T_c \cong 10^{-3} \text{ eV}, \quad \varepsilon_F \cong 10 \text{ eV}, \quad \xi_0 \cong 10^{-4} \text{ cm} \quad \text{és} \quad k_F \cong 10^8 \text{ cm}^{-1};$$

$$\text{Ekkor } \gamma \cong 10^{11} \frac{T_c - T}{T_c} \text{ cm}^{-1}, \quad z \cong 10^{-7} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1/2} \quad \text{és (F. 8)-ból a}$$

$$\frac{T_c - T}{T_c} \gg 10^{-13}$$

számérték adódik a Ginzburg—Landau elmélet érvényességi feltételére.

Nézzük most meg, hogy mekkora a fázisfluktuációk hatása, összehasonlítva a kapott feltételt azzal, ami valós rendparaméter-fluktuációk esetén kapható. Ekkor

* Érdemes megjegyezni, hogy ψ_0 és a $\langle \psi \rangle$ várható érték különbözősége csupán a fázisfluktuációk okozta effektus.

$\langle \psi \rangle = \psi_0$ és az (F. 7) feltétel a

$$\frac{z}{e} \ll 1$$

alakra egyszerűsödik, ami megegyezik a Ginzburg-féle feltétellel [49], Kanadoff et al [53] megfogalmazásában. Beírva z előbb megadott értékét kapjuk, hogy

$$\frac{T_c - T}{T_c} \gg 10^{-15}.$$

Látjuk, tehát, hogy a fázisfluktuációk figyelembevétele körülbelül két nagyságrendet ront a Ginzburg—Landau elmélet alkalmazhatósági tartományán. A kritikus tartomány, melyen belül az elmélet már nem érvényes a fluktuációk túlságosan nagygyá válása miatt azonban így is messze a mérhetőség határán kívül esik szupra-vezetők esetében.

IRODALOM

1. V. L. Ginzburg, L. L. Landau, Zsetf 20, 1064, 1950
2. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. E. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175, 1957
3. L. P. Gorkov, Zsetf 36, 1918, 1959
4. N. R. Werthamer, Phys. Rev. 132, 663, 1963
5. B. Zumino, D. A. Uhlenbrock, Nuovo Cimento 33, 1446, 1964
6. L. Tewordt, Phys. Rev. 132, 595, 1963
7. G. Eilenberger, Zeit. f. Phys. 182, 427, 1965
8. L. P. Gorkov, Zsetf 37, 1407, 1959
9. P. G. de Gennes: Superconductivity of Metals and Alloys, Benjamin, Inc., New York 1966) Ch. 7.
10. Lásd pl. J. R. Schrieffer: Theory of Superconductivity (Benjamin, Inc., New York 1964)
11. J. R. Schrieffer, D. J. Scalapino, J. W. Wilkins, Phys. Rev. Letters 10, 336, 1963
12. N. Menyhárd, Nuovo Cimento 443, 213, 1966
13. G. Eilenberger, V. Ambegaokar, Phys. Rev. 158, 332, 1967
14. E. D. Yorke, A. Bardasis, Phys. Rev. 159, 344, 1967
15. V. L. Ginzburg, Zsetf 23, 236, 1952
16. L. P. Gorkov, T. K. Melik-Barkhudarov, Zsetf 45, 1433, 1963
17. N. Menyhárd, Nuovo Cimento 42, 170, 1966
18. N. Menyhárd, Acta Phys. Hung. 21, 277, 1966
19. L. D. Landau, Soviet Phys. 11, 26, 545, 1937
20. A. A. Abrikosov, Zsetf 32, 1442, 1957
21. P. G. de Gennes: Superconductivity of Metals and Alloys (Benjamin, Inc., New York 1966) Ch. 6.
22. D. Saint James, P. G. de Gennes, Phys. Letters 7, 306, 1963
23. G. A. Baraff, S. Borowitz, Phys. Rev. 121, 1704, 1961
24. D. J. Scalapino, J. R. Schrieffer, J. W. Wilkins, Phys. Rev. 146, 263, 1966
25. G. M. Eliashberg, Zsetf 38, 966, 1960
26. Y. Wada, Phys. Rev. 135A, 1461, 1964
27. D. J. Scalapino, Y. Wada, J. C. Swihart, Phys. Rev. Letters 14, 102, 1965
28. J. C. Swihart, D. J. Scalapino, Y. Wada, Phys. Rev. Letters 14, 106, 1965
29. N. Menyhárd, Nuovo Cimento 37, 331, 1963
30. A. B. Migdal, Zsetf 34, 1438, 1958
31. J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Clarendon Press, Oxford 1960) Ch. V.
32. M. Fowler, R. E. Prange, Physics 1, 315, 1965
33. Lásd pl. J. R. Schrieffer: Theory of Superconductivity (Benjamin, Inc., New York 1964) Ch. 7.
34. D. L. Decker, D. E. Mapother, R. W. Shaw, Phys. Rev. 112, 1888, 1958

35. *B. Rosenblum, M. Cardona*, Phys. Rev. Letters 13, 33, 1964
36. *G. Fischer*, Phys. Rev. Letters 20, 268, 1968
37. *F. W. Smith, M. Cardona*, Solid State Comm. 6, 37, 1968
38. *A. A. Abrikosov*, Zsetf 47, 720, 1964
39. *N. V. Zavaritskii*, Zsetf 43, 1123, 1962
40. *P. Townsend, J. Sutton*, Phys. Rev. 128, 591, 1962
G. I. Rochlin, D. H. Douglass, Jr., Bull. Am. Phys. Soc. 10, 46, 1965
41. *V. L. Pokrovskii*, Zsetf 40, 641, 1961
42. *A. J. Bennett*, Phys. Rev. 140A, 1902, 1965
43. *D. R. Tilley, G. J. van Gorp, C. W. Berghout*, Phys. Letters 12, 305, 1964
44. *W. A. Reed, E. Fawcett, P. P. M. Meincke, P. C. Hohenberg, N. R. Werthamer*, Proceedings of the 10th Intl. Conf. on Low Temp. Physics, Moscow, 1966
45. *P. C. Hohenberg, N. R. Werthamer*, Phys. Rev. 153, 493, 1967
46. Lásd pl. *J. R. Schrieffer*: Theory of Superconductivity (Benjamin, Inc., New York 1964) Ch. 4.
47. *N. Fukuda, Y. Wada, S. Otake*, Prog. Theor. Phys. 21, 343, 1959
48. *A. Zawadowski*, Phys. Rev. Letters 14, 557, 1965
49. *V. L. Ginzburg*, Fiz. Tverd. Tela, 2, 2031, 1960
50. *R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl, P. Szépfalusy*, Phys. Letters 24A, 493, 1967
51. *R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl, P. Szépfalusy*, Phys. Rev. Letters 18, 891, 1967
52. *R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl, P. Szépfalusy*, Annals of Phys. 47, 565, 1968
53. *L. P. Kadanoff, W. Götze, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspens, J. Kane*, Rev. Mod. Phys. 39, 395, 1967
54. *T. M. Rice*, Phys. Rev. 140, A1889, 1965

KÖNYVISMERTETÉS

Б. М. Гугель: ЛЮМИНОФОРЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОВАКУУМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ Energia kiadó, Moszkva, 1967, 343 oldal.

Az utóbbi időben a lumineszcenciával kapcsolatos irodalom olyan széles körű lett, hogy szükségessé vált a felhalmozódott ismeretanyag általános kiértékelése és kritikai elemzése. A tárgykör bizonyos speciális kérdéseivel kapcsolatban már állnak rendelkezésre monográfiák és kézikönyvek, de a fényporok technológiai alkalmazásaival kapcsolatos kérdéseket jobbra csak cikkeken tárgyalják. Ezért szükségesnek látszott olyan speciális könyv kiadása, amely a technikai fényporok sajátosságaival, azok kidolgozásának módszereivel és különböző eszközökben való alkalmazásával kapcsolatosak.

M. B. Gugely „Fényporok a vákuumtechnikai ipar számára” c. könyve a szerzőnek a tapasztalatait foglalja össze a technikai fényporok kidolgozásával és alkalmazásával kapcsolatban, figyelembe véve más szerzőknek a tematikához közeli munkáit is. Elsősorban azokkal a fényporokkal foglalkozik, amelyeket a híradástechnikai iparban a katódsugárcsővek, televíziós képernyők és a lumineszcens lámpák gyártásánál használnak.

A könyv hét fejezetből és előszöből áll. Az első fejezet bevezető jellegű és a lumineszcenciával kapcsolatos alapfogalmakat ismerteti. Tárgyalja továbbá röviden a katódolumineszcencia és a fotolumineszcencia jellemzőit. A lumineszcenciával kapcsolatos elméleti kérdéseket csak annyiban érinti, amennyiben azok segítenek megérteni a fényporoknak a gyakorlati alkalmazással kapcsolatos viselkedését.

A második fejezet a fényporok szintézisének alapjaival foglalkozik. A szerző különös figyelmet szentel a szilárd fázisban lejátszódó kémiai reakciókkal kapcsolatos problémák tárgyalásának, mivel a fényporok az ilyen típusú reakciók révén jönnek létre. Részletes diszkusszió tárgya a szemcse-nagyság kérdése, mivel az ilyen típusú reakcióknál a kiinduló anyag szemcsemérete és formája jelentősen befolyásolja a hőkezelés útján kapott anyag lumineszcens sajátosságait. Ugyanebben a fejezetben tárgyalja a szerző a lumineszcens centrumok kérdését is.

A könyv harmadik—hatodik fejezete a különböző rendeltetésű katódsugárcsővek (az oszcilloszkópok számára, a fekete-fehér és színes televízió számára stb.) működéséhez szükséges fényporokkal foglalkozik, míg a hetedik fejezet a lumineszcens lámpákban használatos fényporokat vizsgálja. Tárgyalja a könyv a fényporok gyártásának elveit, azok alkalmazásának módját a lumineszcens ernyők készítésénél és analizálja a fényporoknak az eszköz működése során jelentkező viselkedésének tapasztalatait. Rámutat a fényporok fő jellemzőinek kapcsolatára azok gyártási feltételeivel és alkalmazásuk módjaival. Részletesen foglalkozik a fényporok stabilitásának problémájával, ami ma a lumineszcencia gyakorlati alkalmazásával kapcsolatos kutatások egyik igen fontos kérdése.

A könyvet tudományos szempontból is nagyon értékesnek tartjuk, elsősorban azért, mert a szerző saját munkássága és eredményei alapján új kutatási irányoknak nyit utat, amelyek ismét a gyakorlat számára válhatnak fontossá. Igen értékes a könyvhöz csatlakozó irodalmi jegyzék, amelynek alapján az egyes részletkérdésekkel foglalkozó kutatók vagy műszakiak az adott kérdésbe alaposabban behatolhatnak.

Befejezve az ismertetést megjegyezzük, hogy a könyv elsősorban azon mérnökök és tudományos dolgozók számára íródott, akik fényporok fejlesztésével, gyártásával és alkalmazásával foglalkoznak. Azonban úgy véljük, hogy hasznos forrást azoknak is, akik a lumineszcencia elméleti kérdéseivel foglalkoznak. Ezáltal talán csökkenne az a távolság, amely még fennáll azok között, akiknek elsődleges célja magyarázni a lumineszcenciát és azok között, akiknek fő tevékenysége a fényporok gyártása és alkalmazása.

Szigeti György és Sviszt Pál

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

BIZONYOS VÉGES CSOPORTOK ÁBRÁZOLÁSAIRÓL*

WIGNER JENŐ

1. Ezen dolgozat célja levezetni a véges csoportok ábrázolásainak egy osztályozását, különös tekintettel azokra a csoportokra, amelyek kielégítik a következő két feltételt:

- a) Minden elem ekvivalens a reciprokával, azaz minden osztály ambivalens.
- b) A csoport bármely két irreducibilis ábrázolásának Kronecker-szorzata (vagy „direkt” szorzata) nem tartalmaz egy ábrázolást sem egynél többször.

Az ilyen jellegű csoportokat E. R. (egyszerűen reducibilis) csoportoknak fogjuk nevezni. A harmad- és negyedfokú szimmetrikus permutáció-csoport, a kvaternió-csoport, a háromdimenziós forgáscsoport, a kétdimenziós unimoduláris unitér csoport E. R. csoportok. Az *a* feltétel jelentése az, hogy minden ábrázolás ekvivalens a konjugált képzetes ábrázolással. Ez a legegyszerűbben oly módon látható, ha fel tesszük, hogy az ábrázolás unitér. Ekkor a reciprok elemekhez tartozó átlósösszegek komplex konjugáltak. Másrésztől azonban egyenlők, mivel ugyanahhoz az osztályhoz tartoznak. Eszerint valamennyi átlósösszeg valós és a komplex konjugált ábrázolások ekvivalensek.

A kvantumelméletben előforduló legtöbb sajátértékprobléma csoportja E. R. Ez a következő okból fontos.

Tegyük fel, hogy két sajátérték-problémánk van, $H_1\psi_1 = \lambda_1\psi_1$ és $H_2\psi_2 = \lambda_2\psi_2$, melyeknek ugyanaz a csoportjuk; itt ψ_1 és ψ_2 különböző terekben vannak definiálva. Gyakran megtörténik¹, hogy az „egyesített rendszert” vesszük szemügyre, amelynek Ψ hullámfüggvényei a ψ_1 és ψ_2 hullámfüggvények tereiből képezett szorzat-térben vannak értelmezve. A „perturbálatlan” sajátérték-egyenlet: $(H_1 + H_2)\Psi = A\Psi$. A $A = \lambda_1 + \lambda_2$ sajátérték multiplicitása egyenlő λ_1 és λ_2 multiplicitásainak szorzatával. A A sajátérték felhasad, ha az említett egyenletbe beírunk egy kicsiny perturbációs tagot. Ha ez a perturbáció ugyanazon csoport transzformációinak alkalmazását engedi meg, mint a két eredeti probléma, és ha ez a csoport kielégíti a fenti *b* feltételt, a sajátfüggvények, melyek a A felhasadása útján előálló sajátértékekhez tartoznak, a sajátérték-problémának a csoporttal szemben mutatott invarianciája alapján „első közelítésben” meghatározhatók. Az E. R. csoportok itt leszámaztandó tulajdonságai alapján a sajátfüggvények alkalmas módon normálhatók (és közöttük számos összefüggés állapítható meg); ezzel másutt fogunk foglalkozni.

A csoport különböző irreducibilis ábrázolásait a *j, k, l* stb. betűkkel fogjuk jelölni. Az azonos ábrázolást (melyben az (1) mátrix felel meg minden egyes elemnek), 0-val jelöljük. A csoportelemek jele *P, Q, R, S, T* stb. lesz. Az ábrázolás sorait és

* Am. Journ. of Math. 63, 57, 1941.

¹ Részletesebb tárgyalást lásd pl. E. Wigner: *Gruppentheorie* stb., Braunschweig, 1931.

oszlopait kis görög betűkkel fogjuk jelölni. Azon mátrix $\kappa\lambda$ elemének, amely a j indexű ábrázolásban az R csoportelemet ábrázolja, $\begin{bmatrix} jR \\ \kappa\lambda \end{bmatrix}$ lesz a jele, úgyhogy

$$\sum_{\lambda} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & S \\ \lambda & \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & RS \\ \kappa & \mu \end{bmatrix}. \quad (1)$$

A karakter rövid jele

$$\sum_{\kappa} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \kappa \end{bmatrix} = [j; R] \quad (1a)$$

lesz. A sorokat vagy az oszlopokat jelző κ, λ indexekre való összegezés mindenkor valamennyi értéken végig fut. A csoport egységelemének jele E lesz; a j ábrázolás foka

$$[j; E] = [j]. \quad (1b)$$

A csillag a komplex konjugáltat fogja jelölni. A j és k ábrázolások Kronecker-szorzata az R csoportelemhez az $M_{\kappa\mu; \lambda\nu}$ mátrixot rendeli, melynek sorait és oszlopait a $\kappa\mu$, ill. $\lambda\nu$ kettős indexek jelölik:

$$M_{\kappa\mu; \lambda\nu} = \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Az R elemnek megfelelő karaktert a

$$\sum_{\kappa\mu} M_{\kappa\mu; \kappa\mu} = \sum_{\kappa\mu} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \kappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k & R \\ \mu & \mu \end{bmatrix} = [j; R][k; R] \quad (2a)$$

kifejezés adja meg. A b feltétel jelentősége a szemügyre vett csoportokra nézve nyilvánvalóvá válik, ha a két ábrázolás Kronecker-szorzatát kiredukáljuk, azaz olyan alakra hozzuk, hogy az irreducibilis ábrázolások összege alakjában jelenik meg. A mátrix, melynek segítségével ez a transzformáció elvégezhető, — bizonyos fázistényezőktől eltekintve — egyértelműen meg van határozva.

Hasznos lehet feljegyezni az irreducibilis ábrázolásokra érvényes jólismert ortogonalitási és teljességi összefüggéseket. Ezek

$$\sum_R \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} k & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix} = \frac{h}{[j]} \delta_{jk} \delta_{\kappa\mu} \delta_{\lambda\nu}, \quad (3)$$

valamint

$$\sum_R [j; R]^* [k; R] = \sum_C n_c [j; C] [k; C] = h \delta_{jk}. \quad (3a)$$

Az összegezést ebben és minden hasonló képletben valamennyi csoportelemre ki kell terjesztenünk;

$$h = \sum_R 1 \quad (4)$$

a csoport rendje. A (3a) képlet második részében a C -re vonatkozó összegezés az összes különböző osztályra terjesztendő ki; n_c az elemek száma a C osztályban.

A teljességi összefüggésekből kapjuk:

$$\sum_{j \neq \lambda} \frac{[j]}{h} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} j & S \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \delta_{R,S}, \quad (5)$$

$$\sum_j [j; R]^* [j; S] = h \Delta_{R,S} / n_R = \sum_Q \delta_{RQ, QS}. \quad (5a)$$

A j -re vonatkozó összegezés az összes különböző irreducibilis ábrázolásra terjesztendő ki; $\delta_{R,S}=1$, ha $R=S$, egyébként zérus, $\Delta_{R,S}=1$, ha R és S ugyanabba az osztályba tartozik, egyébként zérus, végül n_R az R osztályába tartozó elemek száma. Mindegyik ábrázolásról feltesszük, hogy unitér alakú, azaz

$$\sum_{\lambda} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \lambda \end{bmatrix} = \delta_{\kappa\mu}; \quad \sum_{\kappa} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \nu \end{bmatrix} = \delta_{\lambda\nu}. \quad (6)$$

Az irreducibilis ábrázolások általánosságban három csoportba oszthatók be²: az első csoportba azok tartoznak, amelyek valós alakúvá transzformálhatók, a másodikba azok, amelyek nem transzformálhatók valós alakúvá, de ekvivalensek a komplex konjugált ábrázolással, a harmadikba pedig azok, amelyek nem ekvivalensek a komplex konjugált ábrázolással. Analógiában a kétdimenziós unimoduláris unitér csoport esetében szokásos megjelöléssel, az első csoportba tartozó ábrázolásokat *egész* ábrázolásoknak fogjuk nevezni. Ennek megfelelően $c_j=1$ azon j ábrázolások esetében, amelyek valós alakúvá transzformálhatók, $c_j=-1$ a *fél-egész* ábrázolások esetében, vagyis az olyan j ábrázolások esetében, amelyek nem transzformálhatók valós alakúvá, de ekvivalensek a komplex konjugált ábrázolással. Végül $c_j=0$, ha a j ábrázolás nem ekvivalens j komplex konjugáltjával. G. Frobenius és I. Schur szerint²

$$\sum_R [j; R^2] = c_j h. \quad (7)$$

2. Valamely R elem négyzetgyökeinek számát $\zeta(R)$ -rel fogjuk jelölni:

$$\zeta(R) = \sum_S \delta_{R,S^2}. \quad (8)$$

Fennáll:

$$\sum_R \zeta(R)^2 = \sum_{R,S} \zeta(R) \delta_{R,S^2} = \sum_S \zeta(S^2) = \sum_{S,T} \delta_{S^2, T^2}.$$

Az utóbbi összegben S -et TR -rel helyettesítve kapjuk:

$$\sum_R \zeta(R)^2 = \sum_{R,T} \delta_{TRTR, T^2} = \sum_{R,T} \delta_{R, TR^{-1}T^{-1}},$$

minthogy $TRTR$ akkor és csak akkor egyenlő T^2 -tel, ha $R = TR^{-1}T^{-1}$. Adott R -hez akkor és csak akkor található olyan T , hogy $R = TR^{-1}T^{-1}$ teljesüljön, ha R és R^{-1} ugyanazon osztály eleme, azaz ha R ambivalens osztályba tartozik. Ebben az esetben azon T elemek száma, amelyekre $R = TR^{-1}T^{-1}$ teljesül, egyenlő h/n_R -rel, minthogy az R elemmel egy osztályba tartozó n_R elem mindegyikét h/n_R -szer kapjuk meg, ha T befutja a csoport valamennyi elemét. Eszerint

$$\sum_R \zeta(R)^2 = \sum_R h/n_R = h \cdot (\text{az ambivalens osztályok száma}). \quad (9)$$

² G. Frobenius és I. Schur, Berl. Ber. 1906, 186. old.

A második összegezés kizárólag az ambivalens osztályok elemeire terjesztendő ki. Az így kapott eredmény³ igaz minden véges csoportra:

1. Tétel. *Egy véges csoport összes elemeiből vont négyzetgyökök számát négyzetre emelve és összeadva a csoport rendjét kapjuk, megszorozva az ambivalens osztályok számával.*

Az E. R. csoportokban minden osztály ambivalens. Eszerint ezekre fennáll:

$$\sum_R \zeta(R)^2 = hn, \quad (9a)$$

ahol n az összes osztály száma.

Hányszor tartalmazza az i ábrázolást a j és k ábrázolások Kronecker-szorzata? Ezt a számot az

$$(i, j, k) = \sum_C [i; C]^* [j; C] [k; C] n_C / h \quad (10)$$

egyenlet adja meg, ahol az összegezés, mint (3a) második részében, az összes osztályra terjesztendő ki. Megszorozva (7)-et $[j; S]$ -sel és összegezve j -re, (5a) folytán kapjuk:

$$\sum_j c_j h [j; S] = \sum_{R, j} [j; R^2] [j; S] = \sum_R \Delta_{R^2, S} h / n_S = h \zeta(S). \quad (11)$$

Az $R^2 = S$ egyenlet $\zeta(S)$ számú R csoportelemre teljesül; az R^2 elem $n_S \zeta(S)$ számú S csoportelem esetében esik S -sel egy osztályba.

1. Lemma. *Egy E. R. csoport két egész ábrázolásának vagy két fél-egész ábrázolásának Kronecker-szorzata csak egész ábrázolásokat tartalmaz; egy egész és egy fél-egész ábrázolás Kronecker-szorzata csak fél-egész ábrázolásokat tartalmaz.*

Az az unitér mátrix, amely egy egész ábrázolást a komplex konjugált alakba transzformál, szimmetrikus; az pedig, amely egy fél-egész ábrázolást transzformál a komplex konjugált alakba, antiszimmetrikus.² Eszerint az az S unitér mátrix, amely két egész vagy két fél-egész ábrázolás M Kronecker-szorzatát transzformálja a komplex konjugált alakba, szimmetrikus:

$$SM = M^* S; \quad S = S'. \quad (12)$$

Ha M -et az unitér U transzformálja kiredukált alakúvá: $UMU^{-1} = M_r$, úgy

$$S_r M_r = M_r^* S_r; \quad S_r = U^* S U^{-1} \quad (12a)$$

és S_r szintén szimmetrikus. Minthogy M_r és M_r^* megfelelő részei ekvivalensek, és minthogy M_r minden irreducibilis ábrázolást legfeljebb egyszer tartalmaz, S_r kvázi-diagonális mátrix, mint M_r is, és S_r szimmetriája folytán S_r -nek minden almátrixa szimmetrikus. Eszerint M_r minden almátrixa, azaz M minden irreducibilis része, szimmetrikus mátrix segítségével transzformálható a komplex konjugált alakba; így azok egész ábrázolások.

Ha M egy egész és egy fél-egész ábrázolás szorzata, S antiszimmetrikus lesz, és ugyanez igaz lesz S_r -re és annak almátrixaira is. Következésképpen M minden irreducibilis része fél-egész ábrázolás lesz.

³ Ennek ismertnek kellett lennie a ² alatt idézett munka szerzői előtt, mivel az közvetlenül következik a 4. § utolsó mondatának és a 201. oldal dőltbetűs mondatának egybevetéséből.

Az $E. R.$ csoportokra $c_i c_j c_k = 1$, ha (ijk) zérustól különböző.
Mint hogy (ijk) pozitív egész vagy zérus, fennáll:

$$(ijk)^2 \equiv c_i c_j c_k (ijk). \quad (13)$$

Az egyenlőségi jel csak akkor lehet érvényes, ha $(ijk) = 0$ vagy ha $(ijk) = 1$ és $c_i c_j c_k = 1$. Ennek folytán

$$\sum_{ijk} (ijk)^2 \equiv \sum_{ijk} c_i c_j c_k (ijk) \quad (13a)$$

és az egyenlőségi jel csak akkor lehet érvényes, ha valamennyi i, j, k irreducibilis ábrázolás esetében vagy $(ijk) = 0$, vagy pedig $(ijk) = 1$ és $c_i c_j c_k = 1$. Ez a helyzet — az $E. R.$ csoportok definíciója és az 1. lemma szerint — az $E. R.$ csoportokra; megfordítva, ha (13a) alatt az egyenlőségi jel érvényes, a csoport szükségképpen $E. R.$ csoport.

A (11) összefüggés folyományaképpen írható:

$$\begin{aligned} \sum_{ijk} c_i c_j c_k (i, j, k) &= \sum_{ijk} c_i c_j c_k [i; C]^* [j; C] [k; C] n_c / h = \\ &= \sum_{ijk} c_i c_j c_k [i; R]^* [j; R] [k; R] / h = \sum_R \zeta(R)^3 / h. \end{aligned}$$

A (13a) egyenlet bal oldala (5a) folytán így írható:

$$\begin{aligned} \sum_{ijk} (i, j, k)^2 &= \sum_{ijk} \sum_{CC'} [i; C]^* [j; C] [k; C] [i; C'] [j; C']^* [k; C']^* n_c n_{c'} / h^2 = \\ &= \sum_{ik} \sum_C [i; C]^2 [k; C]^2 n_c / h = \sum_C h / n_c = \sum_R h / n_R^2 = \sum_R v_R^2 / h, \end{aligned} \quad (14a)$$

ahol $v_R = h / n_R$ azon elemek száma, amelyek R -rel kommutálnak. Ennek folytán (13a) tartalmát kifejezi a

2. Tétel. A

$$\sum_R \zeta(R)^3 \equiv \sum_R v_R^2 \quad (15)$$

egyenlőtlenség minden véges csoportra érvényes. Az egyenlőségi jel (15) alatt a véges $E. R.$ csoportokra, és csak azokra érvényes.

3. Valamely ábrázolás önmagával képezett Kronecker-szorzatát felbonthatjuk egy

$$B_{\kappa\mu; \lambda\nu} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \lambda \end{bmatrix} \quad (16)$$

szimmetrikus és egy

$$A_{\kappa\mu; \lambda\nu} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \lambda \end{bmatrix} \quad (16a)$$

antiszimmetrikus részre. Könnyen látható, hogy mind B , mind pedig A ábrázolását képezi a csoportnak. Mind a B , mind pedig az A ábrázolás irreducibilis részei egész ábrázolások az $E. R.$ csoportok esetében. A B ábrázolások irreducibilis részeit egész j -re s az A ábrázolások irreducibilis részeit fél-egész j -re páros ábrázolásoknak fogjuk nevezni. Megfordítva, a B ábrázolások irreducibilis részeit fél-egész j -re

és az A ábrázolások irreducibilis részeit egész j -re páratlan ábrázolásoknak nevezzük. Ezt az elnevezést ismét a kétdimenziós unitér csoport ábrázolásainak elméletéből kölcsönözzük.

3. Tétel. Az E, R csoportok ábrázolásai között nem lehet olyan, amely egyszerre páros és páratlan.

A j ábrázolás négyzete szimmetrikus részének átlósösszege

$$X_{js}(R) = \frac{1}{2} [j; R]^2 + \frac{1}{2} [j; R^2], \quad (17)$$

az antiszimmetrikus részé pedig

$$X_{ja}(R) = \frac{1}{2} [j; R]^2 - \frac{1}{2} [j; R^2]. \quad (17a)$$

Annak, hogy két ábrázolásnak nincs közös része, az a feltétele, hogy karaktereik szorzatainak összege eltűnik. A 3. tétel ennél fogva ekvivalens azzal, hogy

$$\frac{1}{4} \sum_R ([j; R]^2 + c_j [j; R^2]) ([k; R]^2 - c_k [k; R^2]) = 0 \quad (18)$$

fennáll minden j -re és k -ra. Minthogy (18) bal oldala természeténél fogva nem lehet negatív (a baloldal ugyanis $\sum n_i m_i$, ahol n_i és m_i azt adja meg, hogy az i ábrázolást hányszor foglalja magában a (18)-beli első, ill. második ábrázolás), (18) fennállása valamennyi j -re és k -ra ekvivalens

$$\begin{aligned} & \sum_R \sum_{jk} ([j; R]^2 + c_j [j; R^2]) ([k; R]^2 - c_k [k; R^2]) = \\ & = \sum_R (h/n_R + \zeta(R^2))(h/n_R - \zeta(R^2)) = \sum_R v_R^2 - \sum_R \zeta(R^2)^2 \end{aligned} \quad (18a)$$

eltűnésével, ahol felhasználtuk (5a)-t és (11)-et. Nyilvánvaló, hogy

$$\sum_S \zeta(S)^3 = \sum_{S,R} \zeta(S)^2 \delta_{S,R^2} = \sum_R \zeta(R^2)^2,$$

úgyhogy (18a) eltűnik a második tétel folyamánnyaképpen. Eszerint a 3. tétel fennáll.

Természetesen egy páros és egy páratlan ábrázolás Kronecker-szorzata általában egyaránt tartalmaz páros és páratlan ábrázolásokat. Azt sem mutattuk meg, hogy minden egész ábrázolás vagy páros, vagy páratlan. Ténylegesen könnyű olyan csoportot találni, melynek van olyan egész ábrázolása, amely nem fordul elő egy ábrázolás négyzetében sem. Ilyenfajta csoportot képeznek az $1, -1, x, -x, y, -y, z, -z$ elemek, az $x^2=y^2=1, z^2=-1, xy=-yx=z, xz=-zx=y, zy=-yz=x$ szorzási szabályok mellett.

A MÁTRIXOKRÓL, AMELYEK EGYSZERŰEN REDUCIBILIS CSOPORTOK ÁBRÁZOLÁSAINAK KRONECKER-SZORZATÁT KIREDUKÁLJÁK*

WIGNER JENŐ

Ez a munka folytatása egy korábbi dolgozatnak.¹ Az olvasó kényelme érdekében azonban alább ismertetem a jelölést. Így szükségtelenné válik a hivatkozás az említett dolgozatra, melynek rövid összefoglalása megtalálható az ¹ lábjegyzetben.

$[j]$ a j ábrázolás dimenziója. A háromdimenziós forgáscsoport esetében $[j] = 2j + 1$.

$\begin{bmatrix} jR \\ \kappa\lambda \end{bmatrix}$ azon mátrix $\kappa\lambda$ eleme, amelyet a j irreducibilis ábrázolás az R csoportelemhez rendel. Szokásos jelölése: $\begin{bmatrix} jR \\ \kappa\lambda \end{bmatrix} = D^{(j)}(R)_{\kappa\lambda}$.

$\begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3 \end{pmatrix}$ a vektorösszeadási modell együtthatója. A kapcsolat a szerző könyvének jelölésével:

$$S_{\mathcal{L}\mu\nu}^{(II)} = (-)^{l-l+\mu+\nu} (2\mathcal{L}+1)^{1/2} \begin{pmatrix} l & l & \mathcal{L} \\ \mu & \nu & -\mu-\nu \end{pmatrix}.$$

$\begin{Bmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ l_1 l_2 l_3 \end{Bmatrix}$ az úgynevezett $W(j_1 l_1, j_2 l_2, j_3 l_3)$ Racah-koefficiens.²

* Ez a dolgozat Wigner Jenő 1939-ben elért eredményeit tárgyalja. A szerző a háború veszélye és az azzal összefüggő elfoglaltsága miatt munkáját akkor nem publikálta. A fordítás egy sokszorosított kézirat alapján készült, mely 1951-ből származik (Princeton). Megjegyezzük, hogy a dolgozat kissé módosított változata megjelent a *Quantum Theory of Angular Momentum* c. kötetben (Ed. by L. C. Biedenharn and H. van Dam, Academic Press, 1965). (A szerk.)

¹ E. P. Wigner, *Am. J. Math.*, **63**, 57, 1941. A jelen cikk szempontjából a következő definíciók és tételek fontosak. Az olyan irreducibilis ábrázolást, amely valós alakra transzformálható, egész ábrázolásnak nevezzük, még akkor is, ha történetesen nem valós alakban használjuk. Az olyan irreducibilis ábrázolást, amely ekvivalens a komplex konjugáltjával, de nem transzformálható valós alakra, fél-egész ábrázolásnak nevezzük. A háromdimenziós forgáscsoport egész j -vel jellemzett $D^{(j)}$ ábrázolásai az előbbire szolgáltatnak példát, a fél-egész j -vel jellemzett ábrázolások pedig az utóbbira. Két egész vagy két fél-egész ábrázolás Kronecker-szorzata csak egész ábrázolásokat tartalmaz; egy egész és egy fél-egész ábrázolás Kronecker-szorzata csak fél-egész ábrázolásokat tartalmaz. Az olyan ábrázolásokat, amelyek egy egész ábrázolás önmagával képezett Kronecker-szorzatának szimmetrizált részében, vagy egy fél-egész ábrázolás önmagával képezett Kronecker-szorzatának antiszimmetrizált részében lépnek fel, páros ábrázolásoknak nevezzük. Azokat az ábrázolásokat, amelyek egy egész ábrázolás antiszimmetrizált négyzetében, vagy egy fél-egész ábrázolás szimmetrizált négyzetében lépnek fel, páratlan ábrázolásoknak nevezzük. Mind a páros, mind a páratlan ábrázolások egész ábrázolások; ezekre példaként szolgálnak a $D^{(j)}$ ábrázolások j páros, ill. páratlan értékei mellett. Megtörténhet, hogy bizonyos ábrázolások sosem lépnek fel egy ábrázolás önmagával képezett Kronecker-szorzatában; ezek az ábrázolások se nem párosak, se nem páratlanok. Nincs azonban olyan ábrázolás, amely egyszerre páros és páratlan, s a háromdimenziós forgáscsoport (vagy a kétdimenziós unitér csoport) minden egész ábrázolása vagy páros, vagy páratlan.

² G. Racah, *Phys. Rev.* **62**, 438 (1942); **78**, 622 (1950).

Mindkét együtthatóra vonatkozóan H. A. Jahn és L. C. Biedenharn³ legutóbb sokkal részletesebb táblázatokat publikáltak, mint amilyeneket a jelen munka tartalmaz.

A csillag a konjugált képzetes mennyiség jele.

Az egész ábrázolások azok, amelyek valós ortogonális alakúvá transzformálhatók; a háromdimenziós forgáscsoport esetében az „egész” ábrázolásokat j egész értékei jellemzik. A fél-egész ábrázolások esetében nem lehetséges ilyen transzformáció, amely őket valós alakra hozná; mindamellettt transzformációval átvihetők a konjugált képzetes ábrázolásba. A háromdimenziós forgáscsoport esetében a fél-egész ábrázolások j értéke fél-egész ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$). Egész ábrázolások direkt szorzatának szimmetrikus része csak páros irreducibilis ábrázolásokat tartalmaz; az antiszimmetrikus rész csak páratlanokat. Ez a „páros” és a „páratlan” ábrázolások definíciója. A háromdimenziós forgáscsoport páros ábrázolásait j páros értéke jellemzi; a páratlan ábrázolásokhoz páratlan j tartozik. Mind a kettő szükségszerűen egész ábrázolás; azt, hogy egy ábrázolás nem lehet egyszerre páros és páratlan, a fent idézett cikkben megmutattuk.¹

I. Egyszerűen reducibilis csoportok

1. *Az egyszerűen reducibilis csoportok definíciója.* Ezen dolgozat fő célja néhány képletet levezetni a háromdimenziós forgáscsoport vagy a kétdimenziós unimoduláris unitér csoport ábrázolásaira vonatkozóan. A leszámaztatandó képletek és összefüggések közül sok megtalálható a ⁴ és ⁵ alatt idézett könyvekben. Mindazonáltal célszerűnek látszik ezt a témát szisztematikusabban és kimerítőbben feldolgozni, mint az eddig történt. Az első öt szakasz eredményei nem csupán az említett folytonos csoportokra lesznek érvényesek, hanem minden véges E. R. (egyszerűen reducibilis) csoportra, minthogy az első öt szakaszban nem használjuk ki a mondott csoportok speciális tulajdonságait.

A dolgozat korábbi részében levezetett egyenletekre a szokásos módon hivatkozunk, amikor azokat újból felhasználjuk. Ezen szabály alól kivételt képez néhány egyenlet, melyek bizonyos szimbólumok szimmetriatulajdonságait fejezik ki és amelyeket anélkül fogunk felhasználni, hogy azokra külön hivatkoznánk. Ezeket az egyenleteket vastagon szedett számok különböztetik meg.

Az E. R. csoportokat a következő tulajdonságaik segítségével definiáltuk¹:

a) két irreducibilis ábrázolás direkt szorzata nem tartalmaz egy irreducibilis ábrázolást sem egynél többször és b) az elemek mindegyike ekvivalens önmaga reciprokával (azaz bennefoglaltatik a reciprokának az osztályában). Az ¹ dolgozatban beveze-

³ H. A. Jahn, *Proc. Roy. Soc. A205*, 192 (1951).

⁴ A csoport paraméterezése és az ábrázolások (29), (30a) alakja ugyanaz, mint E. Wigner „Gruppentheorie und ihre Anwendungen auf etc.” (Braunschweig, 1931) c. könyvének XV. fejezetében. Ugyanez a fejezet tárgyalja a háromdimenziós forgáscsoport és a kétdimenziós unimoduláris unitér csoport között fennálló izomorfizmust.

⁵ Ezen mennyiségekre (melyek lényegében megegyeznek a három- j -szimbólumokkal) vonatkozóan képletgyűjteményt közöl E. U. Condon és G. H. Shortley „The Theory of Atomic Spectra” (Cambridge Univ. Press, London and New York, 1935) c. könyvének III. fejezete. Ilyen jellegű összefüggések természetesen jól ismertek a kvantummechanikában, és a színekpvonalak relatív intenzitásaira s a Zeeman-effektus nagyságára vonatkozó képletek implicite tartalmazznak hat- j -szimbólumokat (Hönl, Kronig, Rubinowicz). Vö. a ⁴ és ⁵ alatt idézett monográfiákkal, különösen az utóbbival.

tett jelöléseket itt is használni fogjuk. A 2—5. szakaszok valamennyi egyenlete érvényes a véges E. R. csoportokra s a fenti folytonos csoportokra is, ha a csoportelemekre vonatkozó összegezést a csoportra kiterjesztett invariáns integrállal, h -t pedig a csoporttérfogattal, vagyis az 1-nek a csoporton képezett integráljával helyettesítjük. Azért, hogy a csoportok e két fajtája között ne kelljen különbséget tennünk, az ¹ dolgozat azon eredményeit (1. lemma, 3. tétel), amelyekre szükségünk lesz, a fenti folytonos csoportokra a 7. szakaszban külön kimondjuk.

2. *Invariáns vektorok az ábrázolás terében (három- j -szimbólumok vagy Clebsch—Gordan-együtthatók). Kovariáns és kontravariáns komponensek.* Jelölje azon unitér mátrix elemeit, amely a j_1 és j_2 ábrázolás Kronecker-szorzatát kiredukált alakra hozza,

$$U_{j_3 \kappa_3; \kappa_1 \kappa_2} = [j_3]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Feltesszük, hogy valamennyi ábrázolás unitér alakú. Az U mátrixelem j_3 és κ_3 indexe a sort jellemzi, κ_1 és κ_2 pedig az oszlopot, melyhez az (1) mátrixelem tartozik. A második tényezőt (1) jobb oldalán „három- j -szimbólum”-nak fogjuk nevezni. Tekintettel az (1) képletre, fennáll:

$$\begin{pmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \sum_{j_3} [j_3] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (2)$$

vagy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (2a)$$

A baloldal az U mátrixból és a j_1 és j_2 ábrázolások Kronecker-szorzatából képezett szorzat $j_3 \kappa_3; \lambda_1 \lambda_2$ mátrixeleme; a jobboldal az említett Kronecker-szorzat kiredukált alakjából és az U mátrixból képezett szorzatnak ugyanezen mátrixeleme. *Mind-ezekben a képletekben és valamennyi ezután következőben is a görög betűkre összegezési konvenció vonatkozik, vagyis mindazon görög betűkre, amelyek ugyanazon kifejezésben kétszer fordulnak elő, összegezni kell.* Abból a célból, hogy az összegzés határait ne kelljen megadnunk, megállapodunk abban, hogy a három- j -szimbólumok zérussal legyenek egyenlők, amennyiben a három j közül az utolsó nem lép fel az első kettőnek a Kronecker-szorzatában. Ekkor minden összegzést kiterjeszthetünk a változók minden lehetséges értékére. Ez természetesen vonatkozik a görög betűkre is, melyek lehetséges értékei a megfelelő ábrázolások sorainak és oszlopainak megjelölésére szolgálnak.

A (2) egyenletnek a (2a) alakon kívül további speciális alakot adhatunk. megszorozva ezt az egyenletet $\begin{pmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{pmatrix}$ -mal és összegezve κ_3 -ra, az ábrázolás unitér voltára tekintettel kapjuk:

$$\begin{pmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (2b)$$

Mondhatjuk: ez a kifejezés azt a tényt fejezi ki, hogy a három- j -szimbólumok invariánsak a csoport operációival szemben. A konjugált képzetes kifejezés, ugyancsak

az ábrázolások unitér jellege folytán, így írható:

$$\begin{bmatrix} j_1 & R \\ \lambda_1 & \kappa_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \lambda_2 & \kappa_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \lambda_3 & \kappa_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^*, \quad (2c)$$

ahol R^{-1} helyére R -et írtunk. Ez az egyenlet azt mutatja, hogy a konjugált képzetes három- j -szimbólumok ugyancsak invariánsak a csoport operációval szemben, ámbar a sorok és az oszlopok szerepet cserélnek.

A (2) egyenlet egy másik alakja azt a tényt fejezi ki, hogy míg $U^{-1} \dots U$ a Kronecker-szorzat kiredukált alakját a Kronecker-szorzatba transzformálja, $U \dots U^{-1}$ viszont a Kronecker-szorzatot a kiredukált alakba transzformálja. Ez az alak így fest:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \lambda_1 & \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \lambda_2 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* = [j_3]^{-1} \delta_{j_3 j'_3} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \lambda_3 & \lambda_3 \end{bmatrix}^*. \quad (2d)$$

A (2) egyenletnek még egy utolsó alakját (5) alatt adjuk meg.

Ha j egész ábrázolás, legyen $(-1)^{2j} = 1$, ha viszont j fél-egész ábrázolás, legyen $(-1)^{2j} = -1$; ennek alapján írható:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} = (-1)^{2j_1+2j_2+2j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

mivel (3) alatt a három- j -szimbólum eltűnik az ¹ dolgozatban bebizonyított lemma értelmében, hacsak $(-1)^{2j_1+2j_2+2j_3} = 1$ nem teljesül. Ha j páros ábrázolás, legyen $(-1)^j = +1$, ha viszont j páratlan ábrázolás, legyen $(-1)^j = -1$ (vö. az ¹ dolgozat 3. tételével). Ha j egész, azonban se nem páros, se nem páratlan, $(-1)^j$ értéke a következők szempontjából lényegtelen és $+1$ -nek vehető. Ha j fél-egész, $(-1)^j$ értékeként tetszésünk szerint választhatjuk az i -t vagy a $-i$ -t; az egyszer választott érték mellett azonban ki kell tartanunk.

Az (1) mátrix unitér voltát a

$$\sum_{j_3} [j_3] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* = \delta_{\kappa_1 \lambda_1} \delta_{\kappa_2 \lambda_2}, \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda' \end{pmatrix}^* = [j]^{-1} (j_1 j_2 j) \delta_{jj'} \delta_{\lambda \lambda'}, \quad (4a)$$

összefüggések fejezik ki. Itt ismét $(j_1 j_2 j) = 1$, ha j_1 és j_2 Kronecker-szorzata tartalmazza j -t, egyébként pedig 0. A három- j -szimbólumok (1) alatt választott normálása olyan, hogy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* = (j_1 j_2 j_3) \quad (4b)$$

teljesül. A három- j -szimbólumokat nem határozza meg teljesen a feltétel, hogy eleget kell tenniük a (2) egyenleteknek. A Kronecker-szorzat kiredukált alakja kommutál mindazokkal az átlós mátrixokkal (és csak azokkal), amelyeknek azon átlós elemei, melyek egyazon ábrázolásnak felelnek meg, egymással megegyeznek. Az (1) transzformációs mátrix ennél fogva megszorozható egy ilyen átlós mátrixszal. Ennek megfelelően a három- j -szimbólum (1) alatt megszorozható egy olyan mennyiséggel,

amely csak j_3 -tól (valamint j_1 -től és j_2 -től) függ, a $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ indexektől azonban független. Ha megköveteljük, hogy (1) továbbra is unitér legyen, ezen határozatlan $\omega(j_1, j_2, j_3)$ tényező abszolút értékének 1-gyel kell egyenlőnek lennie.

Az ortogonalitási összefüggések segítségével az ábrázolási mátrixelemet (2) jobb oldaláról áthozhatjuk a baloldalra. Ily módon kapjuk:

$$\sum_R \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{bmatrix} = h \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

A $[j]^{1/2}$ tényezőnek az (1) képletben az volt a rendeltetése, hogy e kifejezést az ábrázolás mátrixelemeiben szimmetrikussá tegye. Az (5) összefüggésből nyomban következik, hogy

$$\left| \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ \kappa_2 & \kappa_1 & \kappa_3 \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ \kappa_1 & \kappa_3 & \kappa_2 \end{pmatrix} \right|^2 \text{ stb.}, \quad (5a)$$

azaz hogy az oszlopok felcserélése érintetlenül hagyja a három- j -szimbólumok abszolút értékét. Most megmutatjuk, miszerint az utóbbiakat lehet úgy normálni, hogy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ \kappa_2 & \kappa_1 & \kappa_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ \kappa_1 & \kappa_3 & \kappa_2 \end{pmatrix} \quad (6)$$

s ennél fogva

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ \kappa_2 & \kappa_3 & \kappa_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ \kappa_3 & \kappa_1 & \kappa_2 \end{pmatrix} \quad (6a)$$

teljesüljön, azaz hogy a három- j -szimbólumok az oszlopaik páros permutációja esetén változatlanok maradjanak, páratlan permutáció esetén pedig $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ -szorosukra változzanak. Az ¹ dolgozatban bebizonyított lemma, valamint a $(-1)^j$ értékeire vonatkozó megállapodásunk értelmében a $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ tényező ± 1 -gyel egyenlő, hacsak a (6) és (6a) képletekben szereplő három- j -szimbólumok el nem tűnnek.

Abból a célból, hogy a (6) és (6a) képleteket megkapjuk, válasszunk először egy olyan $\kappa_{10}, \kappa_{20}, \kappa_{30}$ index-hármaszt, amely mellett a három- j -szimbólum nem tűnik el. Szorozzuk meg most a $j_1 j_2 j_3$ indexekhez tartozó három- j -szimbólumokat egy 1 abszolútértékű tényezővel, mely a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_{10} & \kappa_{20} & \kappa_{30} \end{pmatrix} \quad (*)$$

szimbólum értékét valóssá és pozitívvá teszi. Azután megszorozhatjuk a

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ \kappa_2 & \kappa_1 & \kappa_3 \end{pmatrix} \quad (+)$$

szimbólumok mindegyikét egy második 1 abszolútértékű tényezővel, úgyhogy (6) első része igaz legyen a $\kappa_{10}, \kappa_{20}, \kappa_{30}$ index-hármasra. Ez nyilván lehetséges, ha j_2 és j_1 egymástól különbözők, minthogy ebben az esetben a (*) és a (+) szimbólumot egymástól teljesen független tényezőkkel szorozhatjuk meg. Ha viszont $j_1 = j_2$, (6)

csak azt a tényt fejezi ki, hogy a j_3 ábrázolás önmagával képezett Kronecker-szorzatának szimmetrikus, ill. antiszimmetrikus részében foglaltatik aszerint, hogy $j_3 - 2j_1$ értéke páros vagy páratlan. Hasonlóképpen elérhető, hogy a (6), (6a) egyenletek mindegyike érvényes legyen egyetlen $\kappa_1 = \kappa_{10}$, $\kappa_2 = \kappa_{20}$, $\kappa_3 = \kappa_{30}$ index-hármasra, melyre (*) nem tűnik el. Ekkor (5)-ből következik — mivel a baloldal nyilván változatlan marad, ha az 1 és 2 indexeket felcseréljük —, hogy (6) és (6a) valamennyi $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ index-hármasra fennáll. A következőkben nem feltétlenül ragaszkodunk ahhoz a normáláshoz, amely mellett (*) valós; megtehetjük, hogy valamennyi három- j -szimbólumot egységnyi abszolútértékű tényezőkkel szorozzuk meg, melyek szimmetrikusan függenek a j_1, j_2, j_3 indexektől. Ez a (6) és (6a) egyenletek érvényességét meghagyja. Ki fog tűnni, hogy a háromdimenziós forgáscsoport esetében valamennyi három- j -szimbólum valósnak választható, és ez lesz az a normálás, amit választani fogunk.

A (2) képlet fontos speciális esetét kapjuk, ha j_2 -t az azonos ábrázolással választjuk egyenlőnek: $j_2 = 0$. Ennek Kronecker-szorzata j_1 -gyel természetesen magát j_1 -et adja, úgyhogy j_3 -nak is j_1 -gyel kell egyenlőnek lennie. Minthogy a j_2 ábrázolásnak csak egy sora van, κ_2 -re nem szükséges összegeznünk. Jelölje $j_2 = 0$ egyedüli sorát $\kappa_2 = 0$. Ekkor (2)-ből következik, hogy

$$[j]^{1/2} \begin{pmatrix} j & 0 & j \\ \kappa & 0 & \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu \end{pmatrix} \quad (7)$$

az az unitér mátrix, mely a j ábrázolást a konjugált komplex alakba transzformálja

$$\begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu \end{pmatrix}^* \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \lambda v \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Az unitér jelleg (4), (4a) feltétele most

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu' \end{pmatrix} = \delta_{\mu \mu'}; \quad \begin{pmatrix} j \\ \kappa' \mu \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu \end{pmatrix} = \delta_{\kappa' \kappa} \quad (9)$$

és (6) helyett

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa \mu \end{pmatrix} = (-1)^{2j} \begin{pmatrix} j \\ \mu \kappa \end{pmatrix}; \quad (10)$$

ez az eredmény jól ismert Frobenius és Schur vizsgálatából.⁶

A (7) alatt definiált egy- j -szimbólum alkalmas arra, hogy betöltse a metrikus tenzor szerepét, melynek segítségével a felső indexek lehozhatók, ill. az alsó indexek felvihetők. Írható tehát

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 \\ \kappa_3 \lambda_3 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & \lambda_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & j_3 \end{pmatrix} \quad (10a)$$

és

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \lambda_1 \kappa_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \lambda_2 \kappa_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \lambda_3 \kappa_3 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix}. \quad (10b)$$

⁶ G. Frobenius és I. Schur, *Sitzber. Deut. Akad. Wiss. Berlin, Kl-Math. Phys. Techn.*, 186. old. (1906).

Ha a (10a), (10b) jelölést kívánjuk használni, mely a kovariáns (standard) és kontravariáns (időtükrözött) három- j -szimbólumok definíciójául szolgál, elővigyázatosaknak kell lennünk, amikor j és κ helyére számokat helyettesítünk. Szükséges, hogy a $j=0, 1, 2, \dots$ ábrázolásoknak, és az ábrázolások $\lambda=0, 1, 2, \dots$ sorainak és oszlopainak megjelölésére különböző fajtájú számokat használjunk.

Tekintettel (9)-re, valamely index a metrikus tenzor komplex konjugáltja segítségével hozható le:

$$\begin{pmatrix} j_3 \\ \kappa_3 \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & \lambda_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}. \quad (10c)$$

Ha ezt a jelölést következetesen kívánnánk alkalmazni, megfelelőnek látszhatna még bevezetni a

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa \lambda \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} \kappa \lambda \\ j \end{pmatrix} \quad (10d)$$

szimbólumot; innen az indexek (10a)-beli és (10b)-beli felvitele természetes szabályként következne. Ne feledjük azonban, hogy a (7) metrikus tenzor csak egész j -re szimmetrikus; fél-egész j -re antiszimmetrikus. Ennélfogva valamely index felvitelekor a metrikus tenzor bal indexe használandó összegező indexként; a lehozatalkor a jobb indexet kell összegező indexként használni. Minthogy a háromdimenziós forgáscsoport esetében a három- j -szimbólumok valamennyien valóságok, ugyanez lesz érvényes a metrikus vagy egy- j -szimbólumra is. Ennélfogva az indexek felvitelét és lehozatalát ebben az esetben ugyanaz a tenzor végzi; mindamellett az indexek sorrendjére tekintettel kell lennünk.

A gondolat, hogy a három- j -szimbólumokra a kontravariáns és kovariáns jelölést alkalmazzuk, C. Herringtől származik. A jelen dolgozatban nem fogjuk teljes mértékben kihasználni.

A (8) és (9) egyenletekből következik, hogy

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 v_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \lambda_2 v_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \lambda_3 v_3 \end{pmatrix}^* = \\ & = \begin{pmatrix} j_1 \\ \kappa_1 \mu_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \kappa_2 \mu_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \kappa_3 \mu_3 \end{pmatrix}^* \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \mu_1 & v_1 \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \mu_2 & v_2 \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \mu_3 & v_3 \end{bmatrix}^*, \end{aligned}$$

s ez az egyenlet (5) segítségével, ha valamennyi R csoportelemre összegezzünk, a

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 v_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \lambda_2 v_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \lambda_3 v_3 \end{pmatrix}^* = \\ & = \begin{pmatrix} j_1 \\ \kappa_1 \mu_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \kappa_2 \mu_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \kappa_3 \mu_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

eredményt adja. Elosztva ezt a baloldali első tényezővel látjuk, hogy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 v_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \lambda_2 v_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \lambda_3 v_3 \end{pmatrix}^* = c \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

ahol c nem függ a v -któl. A (9) ortogonalitási összefüggések segítségével (11) három utolsó tényezője a jobboldalra hozható. A kapott egyenlet komplex konjugáltja

$$(c^*)^{-1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 v_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \lambda_2 v_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \lambda_3 v_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}.$$

Felcserélve itt a λ -kat a v -kkel, megkapjuk ismét (11)-et, és a

$$|c|^2 = (-1)^{2j_1+2j_2+2j_3} = 1 \quad (12)$$

relációt. Látható továbbá (11)-ből, hogy c szimmetrikus függvénye a j -knek. Eszerint elérhető, hogy $c = 1$ legyen, mégpedig oly módon, hogy a három- j -szimbólumokat egységnyi abszolútértékű tényezőkkel szorozzuk meg, melyek csak a j -któl függenek s azoknak szimmetrikus függvényei. Az egyetlen egyenlet, melyet ez az újra-normálás megváltoztathatna, a (7) egyenlet. Azonban könnyen meggyőződhetünk arról, hogy $c = 1$ automatikusan fennáll, ha $j_2 = 0$, hacsak

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 1, \quad (13)$$

azaz: ha az egységmátrixot annak komplex konjugáltjába transzformáló mátrix szerepét az egységmátrix tölti be. Ekkor (11) helyett írható:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 v_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \lambda_2 v_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \lambda_3 v_3 \end{pmatrix}^*. \quad (11a)$$

Tekintettel a (10) és (3) egyenletekre, a görög indexek sorrendjét (11a) valamennyi egy- j -szimbólumában egyidejűleg ellentettre változtathatjuk. Ez azt mutatja, hogy *valamely három- j -szimbólum teljesen kovariáns és teljesen kontravariáns komponensei komplex konjugáltak*. Azért, hogy később hivatkozhatunk rá, felírjuk a (2) egyenlet (8), (11), (9) és (10) segítségével nyert új alakját:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{bmatrix} &= \sum_{j_3} [j_3] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \mu_1 \kappa_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \mu_2 \kappa_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \mu_3 \lambda_3 \end{pmatrix}^* \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \mu_3 & \kappa_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} = \\ &= \sum_{j_3} [j_3] \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \mu_3 & \kappa_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j_3 \\ \mu_3 \lambda_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (14)$$

ez mutatja, hogy az ábrázolás sor-indexének kontravariáns (felső) indexnek kell lennie.

A (4a) egyenlet $j' = 0$, $j_1 = j_2$ speciális esete fontos az alkalmazások szempontjából:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j & j_1 \\ \lambda_1 & \lambda & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \lambda_1 \lambda_2 \end{pmatrix}^* = [j_1]^{1/2} \delta_{j_0} \delta_{\lambda_0}. \quad (15)$$

Ez így is írható

$$\begin{pmatrix} j_1 & \lambda_1 & j \\ \lambda_1 & j_1 & \lambda \end{pmatrix} = [j_1]^{1/2} \delta_{j_0} \delta_{\lambda_0}. \quad (15a)$$

Hasznos lehet itt leszögezni, milyen mértékben rögzítettek a különböző szimbólumokban a határozatlan fázisok. Természetesen minden irreducibilis ábrázolást

transzformációnak vethetünk alá tetszőleges unitér mátrix segítségével, s ez kihatással lesz a három- j -szimbólumokra, valamint a (7) mátrixra. Még ha fel is tesszük, hogy az ábrázolás rögzített alakú, a (7) szimbólumok mindegyike — kivéve (13)-at — megszorozható egy j -től függő tényezővel. Ekkor a három- j -szimbólumok előtt a megfelelő három faktor szorzatának $-\frac{1}{2}$ -ik hatványa jelenik meg mint tényező.

Ha azonban feltételezzük, hogy a (7) alatt definiált egy- j -szimbólumok valamenynyien rögzítettek, úgy csak a három- j -szimbólumok előjeleit változtathatjuk meg, és azokat is csak úgy, hogy egyszerre változtatjuk meg mindazoknak a három- j -szimbólumoknak az előjelét, amelyek ugyanazt a három j -t tartalmazzák.

3. A *hat- j -szimbólumok* (*Racah-együtthatók*). Nyilvánvaló, hogy a három- j -szimbólumok között fenn kell állnia valamilyen kapcsolatnak, amely a közös szorzás asszociatív törvényének felel meg. A (14) egyenlet felhasználásával három ábrázolási mátrixelem szorzatát három különböző módon lehet kifejezni. Az egyik ezek közül:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{bmatrix} = \\ &= \sum_j [j] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 \\ \mu_1 \kappa_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \mu_2 \kappa_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \lambda \eta \end{pmatrix}^* \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & \lambda_3 \end{bmatrix} = \\ &= \sum_{j j_4} [j] [j_4] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j_3 & j_4 \\ \mu & \mu_3 & \mu_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j_3 & j_4 \\ \lambda & \lambda_3 & \lambda_4 \end{pmatrix} \cdot \\ &\cdot \begin{pmatrix} j \\ \lambda \eta \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j \\ \mu \kappa \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 \\ \mu_1 \kappa_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ \mu_2 \kappa_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ \mu_3 \kappa_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_4 \\ \eta_4 \lambda_4 \end{pmatrix}^* \begin{bmatrix} j_4 & R \\ \mu_4 & \eta_4 \end{bmatrix}. \quad (15b) \end{aligned}$$

A (15b) egyenlet baloldala 1-ben és 3-ban szimmetrikus; a jobboldalnak ugyancsak változatlanoknak kell maradnia e két index felcserélésekor. Ily módon olyan egyenletet kapunk, amelynek mind a két oldalán j_4 elhagyható:

$$\begin{aligned} & \sum_{j \mu} [j] \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j \\ \mu_3 & \mu_4 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \mu \kappa \end{pmatrix}^* \cdot \sum_{\eta \lambda} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j \\ \lambda_3 & \lambda_4 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \lambda \eta \end{pmatrix}^* = \\ &= \sum_{j \mu} [j] \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j \\ \mu_3 & \mu_2 & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j \\ \mu_1 & \mu_4 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \mu \kappa \end{pmatrix}^* \cdot \sum_{\eta \lambda} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j \\ \lambda_3 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j \\ \lambda_1 & \lambda_4 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \lambda \eta \end{pmatrix}^*. \quad (16) \end{aligned}$$

A (16) egyenletben elvégzendő minden összegezést explicite jeleztünk. A (16) egyenletek lineáris egyenletrendszer képeznek a baloldalon a pont után álló mennyiségekre vonatkozóan. Az egyenletrendszert megoldhatjuk oly módon, hogy (16)-ot a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ \mu_1 & \mu_2 & \kappa' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j' \\ \mu_3 & \mu_4 & \mu' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j' \\ \mu' \kappa' \end{pmatrix} \quad (17)$$

kifejezéssel megszorozzuk és a $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \kappa', \mu'$ indexekre összegezzük. A fenti mennyiségek ekkor a (16) alatt a jobboldalon a pont után álló mennyiségek lineáris kombinációi alakjában jelennek meg; az együtthatók valamennyi j -től függnék,

a λ -któl azonban függetlenek. Írhatjuk tehát:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j' \\ \lambda_3 & \lambda_4 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' \\ \eta \lambda \end{pmatrix}^* = \\ & = \sum_j (-1)^{2j_4} [j] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j \\ \lambda_3 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j \\ \lambda_1 & \lambda_4 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \eta \lambda \end{pmatrix}^*, \end{aligned} \quad (18)$$

ahol újra használjuk a görög indexekre vonatkozó összegezési konvenciót. A kapcsos zárójel segítségével jelölt együtthatókat hat- j -szimbólumoknak fogjuk nevezni.

A legjobb, ha most (18) jobb oldaláról a három- j -szimbólumokat átvisszük a baloldalra. Ezt a (4) és (9) ortogonalitási összefüggések segítségével tehetjük meg, a (18) egyenletet megszorozva a

$$\begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j'' \\ \lambda_3 & \lambda_2 & \eta'' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j'' \\ \lambda_1 & \lambda_4 & \lambda'' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j'' \\ \eta'' \lambda'' \end{pmatrix}$$

kifejezéssel. Ily módon a jelölés kissé megváltoztatva és a (11a) egyenletet segítségével híva kapjuk:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} &= \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ \kappa_1 & \lambda_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ \mu_1 & \kappa_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \mu_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \cdot \\ & \cdot \begin{pmatrix} j_1 \\ l_1 \kappa_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_2 \\ l_2 \kappa_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_3 \\ l_3 \kappa_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_1 \\ \lambda_1 \mu_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_2 \\ \lambda_2 \mu_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_3 \\ \lambda_3 \mu_3 \end{pmatrix}^* = \\ & = \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & \mu_2 & l_3 \\ \kappa_1 & l_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & \mu_3 \\ \mu_1 & \kappa_2 & l_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 & l_2 & j_3 \\ l_1 & \mu_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (18a)$$

A (18a), (6a) egyenletekből következik, hogy

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ l_2 & l_3 & l_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ l_3 & l_1 & l_2 \end{Bmatrix}, \quad (19)$$

s ha még a (6) egyenletet is tekintetbe vesszük,

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ l_2 & l_1 & l_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ l_1 & l_3 & l_2 \end{Bmatrix} \text{ stb.} \quad (19a)$$

úgyhogy a hat- j -szimbólum oszlopai tetszés szerint felcserélhetők. Hasonlóképpen következik, hogy

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & l_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ j_1 & l_2 & j_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ l_1 & j_2 & j_3 \end{Bmatrix}, \quad (19b)$$

azaz megtehetjük, hogy két oszlopban egyidejűleg a felső ábrázolást felcseréljük az alsóval. A hat- j -szimbólumok szimmetriája a szabályos tetraéderének felel meg; az egy oszlopban álló ábrázolások szemközti éleknek felelnek meg. Azok, amelyek (18a) alatt ugyanabban a három- j -szimbólumban lépnek fel, egy csúcsban találkoznak. A hat- j -szimbólum eltűnik, hacsak bármely két, egy csúcsban találkozó él

Kronecker-szorzata nem tartalmazza mindenkor a szóban forgó csúcsba befutó harmadik élnek megfelelő ábrázolást.

Behelyettesítve a (11a) kifejezést (18a) komplex konjugáltjába, könnyen meggyőződhetünk arról, hogy az egyenlő magával (18a)-val, azaz a hat- j -szimbólumok *valóságok*.

Ha most (18) alatt felcseréljük az 1, 3 indexeket, a (18) jobb oldalán álló kifejezések a baloldalon álló kifejezések lineáris kombinációi alakjában fognak megjelenni. Minthogy ezek, mint $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ függvényei, nyilvánvalóan lineárisan függetlenek, világos, hogy a két együttható-rendszer reciprokl mátrixokat képez:

$$\sum_j [j] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \cdot [j''] \begin{Bmatrix} j_3 & j_2 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} = \delta_{j'j''}. \quad (20)$$

Minthogy a második hat- j -szimbólum első és utolsó oszlopát invertálhatjuk, (20) azt a tényt fejezi ki, hogy

$$R_{j'j} = ([j][j'])^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \quad (20a)$$

valós ortogonális mátrix. Itt j' lehetséges értékei azok, amelyek mind a $j_1 \times j_2$, mind a $j_3 \times j_4$ Kronecker-szorzatban bennfoglaltatnak. A lehetséges j értékek azok, amelyek a $j_1 \times j_4$ és $j_3 \times j_2$ Kronecker-szorzatokban közösek. Megfelelően (20a)-nak, $j_1 \times j_2$ és $j_3 \times j_4$ közös irreducibilis részeinek száma meg kell, hogy egyezzek $j_1 \times j_4$ és $j_2 \times j_3$ közös irreducibilis részeinek számával; erről közvetlenül is meggyőződhetünk.

A (18) képlet jobb oldalán felcserélhetjük az első három- j -szimbólum első két oszlopát. Ez a $(-1)^{j+j_2+j_3}$ tényező felléptét eredményezi. Ezután újból alkalmazhatjuk (18)-at a nyert egyenlet jobb oldalára, amely ily módon a

$$\sum_{jj''} (-1)^{j+j_2+j_3} [j][j''] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & j'' \\ \lambda_1 & \lambda_3 & \eta \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_4 & j'' \\ \lambda_2 & \lambda_4 & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'' \\ \eta \lambda \end{Bmatrix}^*$$

alakot ölti. Másrésztől megtehetjük, hogy először (18) bal oldalán cseréljük fel az első három- j -szimbólum első két oszlopát és azután alkalmazzuk (18)-at. Ily módon kapjuk:

$$\sum_{j''} (-1)^{2j_4+j_1+j_2+j'} [j''] \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j' \\ j_3 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j_1 & j'' \\ \lambda_3 & \lambda_1 & \eta \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_4 & j'' \\ \lambda_2 & \lambda_4 & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'' \\ \eta \lambda \end{Bmatrix}^*.$$

Ennek, valamint az előbbi kifejezésnek az összehasonlítása a

$$\sum_j (-1)^{j+j'+j''} [j] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j' \\ j_3 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} \quad (21)$$

eredményre vezet. A jobboldalt (20) segítségével áthozva a baloldalra, ezen összefüggés szimmetrikusabb alakját nyerjük:

$$\sum_{ll'} (-1)^{j+l+l'} [j][l][l'] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_3 & j_4 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_4 & l \\ j_2 & j_3 & l' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & l' \\ j_4 & j_2 & j' \end{Bmatrix} = \delta_{jj'}. \quad (21a)$$

Az egyes j_k indexek a (21a) képletben a következőképpen vannak elrendezve: j_1 mindig a bal felső sarokban foglal helyet. Éppúgy elfoglalhatná azonban azt a helyet bármely másik j_k is. Egyébiránt a j_k indexek elhelyezkedése mindegyik három- j -szimbólumban más és más. Elhelyezkedésükre jellemző, hogy mind a két három- j -szimbólum, amelyben ugyanaz az összegező index (l vagy l') lép fel, ezen index értékeit ugyanazon sorozatra korlátozza. Ez l esetében pl. $j_1 \times j_4$ és $j_2 \times j_3$ közös része. Ugyanezeket az értékeket veszi fel j és j' is. A fenti képletek speciális esetei közül a következőket említjük meg. Legyen (18a) alatt $l_1 = 0$; az $l_3 = j_2$, $l_2 = j_3$ esettől eltekintve zérust kapunk. Ebben az esetben az összegezés (4b), (7), (9) és (11a) segítségével elvégezhető; ily módon kapjuk:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & j_3 & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} ([j_2] [j_3])^{-1/2} (j_1 \ j_2 \ j_3). \quad (18b)$$

Ha most (20) alatt j'' helyett 0-t írunk, a $j_1 = j_2$, $j_3 = j_4$ esetben kapjuk:

$$\sum_j (-1)^{j_1+j_3+j} [j] \begin{Bmatrix} j_1 & j_1 & j' \\ j_3 & j_3 & j \end{Bmatrix} = \delta_{j'0} ([j_1] [j_3])^{1/2}. \quad (20b)$$

A (21) egyenletben j'' helyett 0-t írva hasonlóképpen kapjuk:

$$\sum_j [j] \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_1 & j_2 & j \end{Bmatrix} = (-1)^{2j_1+2j_2}. \quad (21b)$$

Végezetül megemlítünk egy képletet, mely közvetlenül következik (18)-ból s amely hasznos lesz, ha majd a három- j -szimbólumokat kívánjuk kiszámítani. Ezt oly módon kapjuk meg, hogy a három- j -szimbólumot (18) alatt a jobboldalról áthozzuk a baloldalra (11a) és (4a) segítségével. A jelölés csekély megváltoztatása után kapjuk:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ i_1 & i_2 & i_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ i_1 & \lambda_2 & \eta_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ \eta_1 & i_2 & \lambda_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \eta_2 & i_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 \\ \lambda_1 \eta_1 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} l_2 \\ \lambda_2 \eta_2 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} l_3 \\ \lambda_3 \eta_3 \end{Bmatrix}^* = \\ &= \begin{Bmatrix} j_1 & \eta_2 & l_3 \\ i_1 & l_2 & \eta_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & j_2 & \eta_3 \\ \eta_1 & i_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \eta_1 & l_2 & j_3 \\ l_1 & \eta_2 & i_3 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (22)$$

4. A metrika az ábrázolási térben. Ha a j_1 ábrázolást a

$$\begin{bmatrix} j_1 & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix} = u_{\kappa\mu}^* \begin{bmatrix} j_1 & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} u_{\lambda\nu} \quad (23)$$

unitér transzformációnak vetjük alá, az összes előző képlet érvényes marad, ha a három- j -szimbólumokat ugyanakkor a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} u_{\kappa\mu} \quad (j_2, j_3 \neq j_1) \quad (23a)$$

kifejezésekkel helyettesítjük. Az egy- j -szimbólumok a

$$\begin{pmatrix} j \\ \mu \nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j \\ \kappa \lambda \end{pmatrix} u_{\kappa\mu} u_{\lambda\nu} \quad (23b)$$

kifejezésekkel helyettesítendők. Ez mutatja, hogy $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix}$ három- j -szimbólum κ_1 indexe jellegét tekintve vektor-index a j_1 ábrázolás unitér ábrázolási terében. Az egy- j -szimbólum ezzel szemben szimmetrikus vagy antiszimmetrikus tenzor attól függően, hogy a j ábrázolás egész vagy fél-egész jellegű. Annak lehetősége, hogy az egy- j -szimbólumot mint metrikus tenzort felhasználjuk, összefügg annak lehetőségével, hogy az irreducibilis ábrázolási terekben bevezessük az időtükrözési operációt. Valóban, ha ψ_λ egy vektor komponenseit jelöli az ábrázolás terében, úgy $\varphi_\lambda = (\psi^\lambda)^*$ az időtükrözéssel nyert vektor komponenseit adja meg, ahol

$$\psi^\lambda = \psi_\kappa \begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix}^*. \quad (24)$$

Minthogy az időtükrözés független a koordináta-rendszer választásától az ábrázolási térben és invariáns az alapul vett csoport (ezek mind térbeli csoportok) transzformációival szemben, a kovariáns komponensekre való áttérésnek ugyancsak rendelkeznie kell mindezekkel a tulajdonságokkal. Ez közvetlenül is igazolható és — hacsak nem vagyunk hajlandók elfogadni az előbbi érvet — a mondott igazolás szükséges ahhoz, hogy megállapítsuk: a ko- és kontravariáns komponensek kalkulusa konzisztens. Ami a csoportot képező transzformációkat illeti, ez következménye (8)-nak, a részletes igazolást azonban nem végezzük el. Ha a ψ vektor komponenseit a második koordináta-rendszerben $\bar{\psi}_\nu$ jelöli, írhatjuk:

$$\bar{\psi}^\nu = \bar{\psi}_\mu \left(\begin{pmatrix} j \\ \mu\nu \end{pmatrix} \right)^* = \psi_\kappa u_{\kappa'\mu} \begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix}^* u_{\kappa\mu}^* u_{\lambda'\nu}^* = \psi_\kappa \begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix}^* u_{\lambda'\nu}^* = \psi^\lambda u_{\lambda'\nu}^*. \quad (24a)$$

Ez megadja a kontravariáns komponensekre érvényes transzformációs törvényt. Immár könnyen verifikálhatjuk, hogy két vektor, ψ és φ

$$\bar{\psi}^\nu \bar{\varphi}_\nu = \psi^\lambda u_{\lambda'\nu}^* \varphi_\kappa u_{\kappa\nu} = \psi^\kappa \varphi_\kappa \quad (25)$$

kontrakciója független a koordináta-rendszerétől. Ez biztosítja a kalkulus konzisztenciáját. Meg kell azonban jegyezni, hogy fél-egész j -re az egy- j -szimbólum antiszimmetriája folytán $\psi^\kappa \varphi_\kappa = -\psi_\kappa \varphi^\kappa$.

Természetesen felmerül az ábrázolási tér koordináta-transzformációival szemben invariáns kifejezések kérdése. Egy ilyen invariáns nyilvánvalóan

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

Ennek értéke azonban (4a) szerint $(j_1 j_2 j_3)$. Következő lépésként ésszerűnek látszik a

$$\begin{pmatrix} j_1 & \kappa_1 & j_2 \\ \kappa_1 & j_1 & \kappa_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & \kappa_3 \\ j_2 & \kappa_3 & j_3 \end{pmatrix}$$

alakú kifejezésekkel próbálkozni. Ezek azonban (15) folyományaképpen eltűnnek, hacsak j_2 nem egyenlő zérussal; ekkor azonban a három- j -szimbólum valójában egy- j -szimbólum. Ebben az esetben ismét triviális a kifejezés.

A legegyszerűbb nem-triviális, az ábrázolási terekben végrehajtott koordináta-transzformációkkal szemben invariáns kifejezések 4 három- j -szimbólumból épülnek fel; (18a) mutatja, hogy a hat- j -szimbólum egy ilyen invariáns. Tekintetbe véve a (4a)

képletet, könnyű meggyőződni arról, hogy ez a legáltalánosabb olyan invariáns, amely csupán 4 három- j -szimbólumból áll, és amelyet nem lehet teljesen kontrahálni. Ez megmagyarázza a hat- j -szimbólumok jelentőségét.

5. *A hat- j -szimbólumok további tulajdonságai.* A hat- j -szimbólumokra vonatkozóan levezethetünk egy összefüggést, mely mind levezetését, mind alkalmazásait tekintve hasonló a három- j -szimbólumokra érvényes (18) egyenlethez. Ebből a célból három- j -szimbólumok olyan kombinációit kell szemügyre vennünk, amelyek különféleképpen kifejezhetők a három- j -szimbólumokból álló sorok alakjában. A (15b) képletben az ábrázolás mátrixelemeinek egy kombinációjából indultunk ki, melyet kétféleképpen fejezhetünk ki ábrázolási mátrixelemek sora alakjában. A két sor együtthatóinak az összehasonlítása összefüggést adott meg a három- j -szimbólumokra vonatkozóan, ebben a szakaszban pedig az összehasonlítás a hat- j -szimbólumokra érvényes összefüggést fog megadni. Az

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} l_1 & k_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \kappa_2 & \iota_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & k_3 \\ \iota_1 & \lambda_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & j_2 & l_3 \\ \kappa_1 & \iota_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 & \lambda'_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \kappa'_1 & \kappa'_2 & \kappa'_3 \end{pmatrix} \\ & \cdot \begin{pmatrix} l_1 \\ \lambda_1 \lambda'_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_2 \\ \lambda_2 \lambda'_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_3 \\ \lambda_3 \lambda'_3 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k_1 \\ \kappa_1 \kappa'_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k_2 \\ \kappa_2 \kappa'_2 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k_3 \\ \kappa_3 \kappa'_3 \end{pmatrix}^* \end{aligned} \quad (26)$$

kifejezésben a (18) összefüggést alkalmazhatjuk a harmadik s a negyedik, és a második s az ötödik három- j -szimbólum szorzatára (a megfelelő egy- j -szimbólumokkal együtt). Ily módon kapjuk:

$$\begin{aligned} & \sum_{lk} \begin{pmatrix} l_1 & k_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \kappa_2 & \iota_3 \end{pmatrix} (-1)^{2k_1+2k_2+2l_2} [l] [k] \begin{Bmatrix} k_1 & j_2 & l_3 \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l \\ \lambda'_1 & \iota_2 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & l_2 & l \\ \kappa'_1 & \lambda_2 & \lambda \end{pmatrix}^* \\ & \cdot \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & k_3 \\ k_1 & k_2 & k \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & k \\ \iota_1 & \lambda_2 & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & k_2 & k \\ \iota_1 & \kappa'_2 & \kappa' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ \kappa \kappa' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_1 \\ \lambda_1 \lambda'_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k_2 \\ \kappa_2 \kappa'_2 \end{pmatrix}^* ; \end{aligned}$$

itt a (11a) képletet is felhasználtuk. Ez a kifejezés kontrahálható a (4a) ortogonalitási összefüggés segítségével; ez után csak az l indexre vonatkozó összegezés marad. A kapott kifejezésben két olyan három- j -szimbólum van, amelynek az utolsó felső indexe l . Ezek szorzata ugyancsak átalakítható (18) segítségével. Így a

$$\begin{aligned} & \sum_{lj} (-1)^{2k_1+2l_2} [l] [j] \begin{Bmatrix} k_1 & j_2 & l_3 \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & k_3 \\ l_1 & k_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & j_2 & l \\ j_1 & k_2 & j \end{Bmatrix} \\ & \cdot \begin{pmatrix} l_1 & k_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \kappa_2 & \iota_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \iota_1 & l_2 & \iota \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & k_2 & j \\ \lambda'_1 & \kappa'_2 & \iota' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \iota \iota' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} l_1 \\ \lambda_1 \lambda'_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k_2 \\ \kappa_2 \kappa'_2 \end{pmatrix}^* \end{aligned}$$

kifejezést kapjuk. Itt újabb kontrakciót végezhetünk (11a) és (4a) segítségével; ennek folytán esik a j indexre vonatkozó összegezés. Ily módon (26)-ra az alábbi egyenlőség bal oldalán álló kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} & \sum_l (-1)^{2l} [l] \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & k_3 \\ k_1 & k_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & j_2 & l_3 \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & k_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & l \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \iota_1 & \iota_2 & \iota_3 \end{pmatrix} = \\ & = \sum_l (-1)^{2l} [l] \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & k_3 \\ l & j_2 & j_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & j_2 & l_3 \\ l & k_2 & k_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & k_2 & j_3 \\ l & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \iota_1 & \iota_2 & \iota_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (26a)$$

A jobboldalt azon megjegyzés alapján nyerjük, hogy (26) invariáns az 1, 2, 3 indexek ciklikus permutációival szemben. Az utolsó faktor (26a) alatt természetesen mellőzhető. Ha a hat- j -szimbólumok egyikét a (20) ortogonalitási összefüggés segítségével a baloldaltól áthozzuk a jobboldalra, némi átalakítás után kapjuk:

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ k_1 & k_2 & k_3 \end{Bmatrix} = \\ & = \sum_{kl} (-1)^{2j_1+2l} [k] [l] \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ k & k_2 & k_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ k & k_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & j_2 & k_3 \\ k & l_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix}. \quad (26b) \end{aligned}$$

Ez az egyenlet (22)-höz hasonló s azt a hat- j -szimbólumok kiszámítására fogjuk felhasználni.

6. *A hat- j -szimbólumok előállítása csoportintegrálok segítségével.* Amint már említettük, ha a j ábrázolást az u mátrixszal unitér transzformációnak vetjük alá, a három- j -szimbólumok a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \eta \end{pmatrix} u_{\eta\lambda}$$

módon transzformálódnak. Másrésztől az egy- j -szimbólum

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} j \\ \mu\nu \end{pmatrix} u_{\mu\kappa} u_{\nu\lambda}$$

szerint transzformálódik. Láttuk, hogy — ezen kifejezések folyományaképpen — a hat- j -szimbólumok az alapul vett ábrázolás unitér transzformációival szemben invariánsak. Másrésztől, ha (18a) alatt a négy három- j -szimbólum egyikének megváltoztatjuk az előjelét (vö. a 2. szakasz utolsó bekezdésével), a hat- j -szimbólum előjele ugyancsak megváltozik.

Ésszerűnek látszik ezért a hat- j -szimbólumok olyan szorzatait megvizsgálni, amelyek változatlanok maradnak, ha a három- j -szimbólumok előjelét megváltoztatjuk. Ilyen kombináció mindenekelőtt [vö. (18a), (11a)]

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j'_1 & j'_2 & j'_3 \end{Bmatrix}^2 = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j_1 & j'_2 & j'_3 \\ \kappa'_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j_1 \\ \kappa_1 \kappa'_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_1 & j_2 & j'_3 \\ \mu_1 & \kappa_2 & \mu_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_1 & j'_2 & j_3 \\ \mu'_1 & \mu_2 & \kappa_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_1 \\ \mu_1 \mu'_1 \end{Bmatrix}^* \\ & \cdot \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j'_2 & j'_3 \\ l'_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 \\ l_1 l'_1 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j'_1 & j_2 & j'_3 \\ \lambda_1 & l_2 & \lambda_3 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j'_1 & j'_2 & j_3 \\ \lambda'_1 & \lambda_2 & l_3 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j'_1 \\ \lambda_1 \lambda'_1 \end{Bmatrix} = \\ & = \sum_{RSTU} h^{-4} \begin{Bmatrix} j_1 & R \\ \kappa_1 & l_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & R \\ \kappa_2 & l_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & R \\ \kappa_3 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & S \\ \kappa_1 & l_1 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j'_2 & S \\ \mu_2 & \lambda_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_3 & S \\ \mu_3 & \lambda_3 \end{Bmatrix} \\ & \cdot \begin{Bmatrix} j'_1 & T \\ \lambda_1 & \mu_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & T \\ l_2 & \kappa_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_3 & T \\ \lambda_3 & \mu_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_1 & U \\ \lambda_1 & \mu_1 \end{Bmatrix}^* \begin{Bmatrix} j'_2 & U \\ \lambda_2 & \mu_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & U \\ l_3 & \kappa_3 \end{Bmatrix} = \\ & = \sum_{RSTU} h^{-4} [j_1; RS^{-1}] [j_2; RT] [j_3; RU] [j'_1; TU^{-1}] [j'_2; SU] [j'_3; ST]; \end{aligned}$$

itt felhasználtuk az (5) és (8) képleteket.* A jelölés csekély megváltoztatásával kapjuk:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j'_1 & j'_2 & j'_3 \end{matrix} \right\}^2 = h^{-3} \sum_{R_1 R_2 R_3} [j_1; R_1] [j_2; R_2] [j_3; R_3] \cdot \\ \cdot [j'_1; R_2 R_3^{-1}] [j'_2; R_3 R_1^{-1}] [j'_3; R_1 R_2^{-1}]. \quad (27)$$

Hasonló módon következnek a

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_1 & j_2 & j \end{matrix} \right\} = \frac{(-1)^{2j}}{h^2} \sum_{RS} [j_1; SR] [j_2; S^{-1}R] [j; S] [j'; R], \quad (27a)$$

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_2 & j \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j'' \\ j_3 & j_2 & j' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ j_3 & j_2 & j'' \end{matrix} \right\} = \\ = \frac{(-1)^{2j_1}}{h^4} \sum_{RXYZ} [j_1; RY] [j_2; RXYZR] [j_3; RXZ] [j; X] [j'; Y] [j''; Z], \quad (27b)$$

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{matrix} \right\} = \\ = \frac{(-1)^{2l_1}}{h^5} \sum_{URVSW} [j_1; R] [j_1; S] [j_2; UVWRWS] \cdot \\ \cdot [j_3; R^{-1}UVWSV] [l_1; U] [l_2; V] [l_3; W] \quad (27c)$$

egyenletek is. Az első ezek közül a véges csoportok esetében meglehetősen kényelmes utat kínál a hat- j -szimbólumok abszolút értékének meghatározása számára. A többi egyenlet lehetővé teszi a hat- j -szimbólumok előjelei közül azoknak a meghatározását, amelyek nem választhatók tetszés szerint. A legtöbb esetben könnyebb lesz, ha a hat- j -szimbólumokat az előző szakaszok képletei segítségével hasonlítjuk össze, mint ha a (27) egyenleteket hívjuk segítségül; ez utóbbiakat pedig a csoportra kiterjesztett összegek és integrálok kiszámítására használjuk fel.

II. A háromdimenziós forgáscsoport

7. *A háromdimenziós forgáscsoport ábrázolásai.* A dolgozat hátralevő része az előző szakaszokban kapott képleteknek a kétdimenziós unimoduláris unitér csoport ábrázolásaira való alkalmazásaival foglalkozik. Ebből a célból először röviden összefoglaljuk az ezen csoport ábrázolásaira vonatkozó jól ismert eredményeket. A csoportot a szokásos módon parametrizáljuk, az elemeket egy átlós, egy valós és egy másik átlós mátrix szorzataként írva. A csoportelemek így módon három szög: α , β és γ segítségével jellemezhetők. A tartomány, amelyben α változik, -2π -től 2π -ig terjed; a β szög 0 -tól π -ig, a γ szög $-\pi$ -től π -ig változik. Az α , β , γ

* Felhasználásra került továbbá az ¹ dolgozatban bevezetett $\sum_{\kappa} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \kappa \end{bmatrix} = [j; R]$ jelölés. (A ford. megj.)

szögeknek megfelelő csoportelem

$$Z_\alpha Y_\beta Z_\gamma = \begin{vmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ \sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} e^{-i\gamma/2} & \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{vmatrix}. \quad (28)$$

A (28) mátrixok természetesen ábrázolását képezik önmaguk csoportjának; ez a $j = \frac{1}{2}$ ábrázolás. Ennek megfelelően (28) két sora és oszlopa a $-\frac{1}{2}$ és $\frac{1}{2}$ indexeket kapja. A j ábrázolás (28) $2j$ -edik hatványának szimmetrikus része, s azt a

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} j & R \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} &= \frac{[(j+\kappa)!(j-\kappa)!(j+\lambda)!(j-\lambda)!]^{1/2}}{(2j)!} \\ &\cdot \sum_{\substack{v_1+\dots+v_{2j}=\kappa \\ \mu_1+\dots+\mu_{2j}=\lambda}} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & R \\ v_1 & \mu_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & R \\ v_2 & \mu_2 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & R \\ v_{2j} & \mu_{2j} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (29)$$

képlet definiálja⁷, ahol κ és λ a $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ értékeket veheti fel és

$$\frac{(2j)!}{(j+\kappa)!(j-\kappa)!}$$

azt adja meg, hogy v_1, \dots, v_{2j} hányféleképpen választható meg oly módon, hogy közülük $j+\kappa$ -nak $+\frac{1}{2}$ és $j-\kappa$ -nak $-\frac{1}{2}$ legyen az értéke, azaz összegük κ legyen.

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy (29) a $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ értékek mind-egyikére a csoport unitér ábrázolását képezi.

Speciálisan (29) az átlós mátrixok ábrázoló mátrixokat szintén átlós alakban szolgáltatja:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} j & Z_\alpha \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} &= \frac{[(j+\kappa)!(j-\kappa)!(j+\lambda)!(j-\lambda)!]^{1/2}}{(2j)!} \\ &\cdot \sum_{\substack{v_1+\dots+v_{2j}=\kappa \\ \mu_1+\dots+\mu_{2j}=\lambda}} e^{i(v_1+\dots+v_{2j})\alpha} \delta_{v_1\mu_1} \dots \delta_{v_{2j}\mu_{2j}} = \\ &= \frac{(j+\kappa)!(j-\kappa)!}{(2j)!} \sum_{v_1+\dots+v_{2j}=\kappa} e^{i\kappa\alpha} \delta_{\kappa\lambda} = \delta_{\kappa\lambda} e^{i\kappa\alpha}; \end{aligned} \quad (30)$$

a valós mátrixokat — természetesen — ugyancsak valós mátrixok ábrázolják. Ezekre a számítás a ⁴

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} &= \sum_{\eta} (-1)^{j+\lambda-\eta} \frac{[(j+\kappa)!(j-\kappa)!(j+\lambda)!(j-\lambda)!]^{1/2}}{(\eta-\kappa-\lambda)!\eta!(j+\kappa-\eta)!(j+\lambda-\eta)!} \\ &\cdot \cos^{2\eta-\kappa-\lambda} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j+\kappa+\lambda-2\eta} \frac{1}{2} \beta \end{aligned} \quad (30a)$$

⁷ Vö. F. D. Murnaghan, Group Representations (Baltimore, Maryland, 1938).

kifejezést szolgáltatja. Az η -ra való összegezés azokra az egész számokra terjesztendő ki, amelyekre a nevezőben álló faktoriálisok egyike sem válik negatívvá. Vegyük szemügyre külön a (30a) kifejezést a $\kappa = \pm j$ speciális esetben. A ν -re vonatkozó összeg (29) alatt ebben az esetben az egyetlen $\nu_1 = \nu_2 = \dots = \nu_{2j} = \frac{1}{2}$ tagra korlátozódik és az összeg minden tagja egyenlő. Így tehát

$$\begin{bmatrix} j & R \\ j & \lambda \end{bmatrix} = \left(\frac{(2j)!}{((j-\lambda)!(j+\lambda)!)} \right)^{1/2} e^{ij\alpha} \cos^{j+\lambda} \frac{1}{2} \beta \sin^{j-\lambda} \frac{1}{2} \beta e^{i\lambda\gamma}. \quad (30b)$$

Megjegyezzük, hogy azok az unitér mátrixok, amelyeknek ugyanazon $e^{\frac{1}{2}i\varphi}$, $e^{-\frac{1}{2}i\varphi}$ értékek a sajátértékei, egy-egy osztályt képeznek. A Z_φ átlós mátrixok között minden osztály képviselőit megtaláljuk; Z_φ és $Z_{-\varphi}$ ugyanabba az osztályba tartozik. A j ábrázolás karakterét könnyen megkaphatjuk a (30) képletből:

$$[j; \varphi] = \sum_{\kappa=-j}^j e^{i\kappa\varphi}. \quad (31)$$

A (31) képlet segítségével könnyen megállapíthatjuk, hogy a j és j' ábrázolások Kronecker-szorzatának irreducibilis részei az alábbiak:

$$j \times j' = |j-j'|, |j-j'|+1, |j-j'|+2, \dots, j+j'-1, j+j'. \quad (31a)$$

A j ábrázolás dimenziója nyilvánvalóan

$$[j] = 2j+1. \quad (31b)$$

A mátrixnak, amely egy ábrázolást a komplex konjugált alakba transzformál, egy önkényes tényezőtől eltekintve, melyet 1-nek választunk,

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} j & Y_{-\pi} \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix}. \quad (32)$$

-val kell egyenlőnek lennie. Ez következik abból, hogy ennek a mátrixnak az ábrázolás összes valós mátrixával kommutálnia kell és a (30) alakú mátrixokat azok reciprokává kell transzformálnia. Az Y_π csoportelemnek megfelelő mátrix nyilvánvalóan teljesíti mind a két feltételt. A (28), (29) képletekből könnyen látható, hogy

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa\lambda \end{pmatrix} = (-1)^{j-\lambda} \delta_{\kappa, -\lambda} = (-1)^{j+\kappa} \delta_{\kappa, -\lambda}. \quad (32a)$$

Az előző fejtegetésekre való hivatkozás nélkül is látható, hogy az egy- j -szimbólumok számára feltételezhetjük a (32a) alakot; csak azt kell feltennünk, hogy az egész j -vel jellemzett ábrázolások valós alakra hozhatók, a fél-egész j -vel jellemzett ábrázolások azonban nem (azaz: valamely ábrázolás egész, ha a j index egész és fél-egész, ha a j index fél-egész). Egész j esetén valóban kezdettől fogva feltehető, hogy az ábrázolás valós; ekkor az egységmátrix transzformálja a komplex konjugált alakba. Ha most az ábrázolást egy u^{-1} unitér mátrix segítségével transzformációnak vetjük alá, úgy, azt a komplex konjugált alakra az $u'u$ mátrix segítségével elvégzett

további transzformáció hozza. Jelöljük a (32a) mátrixot (mely egész j esetén szimmetrikus) J -vel s az egységmátrixot I -vel. Az u mátrixot így választhatjuk:

$$u = \frac{1}{2}(1-i)(iI+J) \quad (32b)$$

$J^2 = I$ folytán kapjuk:

$$u'u = \frac{1}{4}(1-i)^2(-I+2iJ+I) = J.$$

Fél-egész j esetén (32a) alakja — a sorok és az oszlopok sorrendjétől eltekintve — máris a szokásos.

Abból, hogy (32a) felcserélhető az Y_β -nak megfelelő mátrixokkal, következik:

$$\begin{pmatrix} j \\ \kappa \lambda \end{pmatrix} \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \lambda & -\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j \\ \lambda - \mu \end{pmatrix} \quad (33)$$

vagy

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ -\kappa & -\mu \end{bmatrix} = (-1)^{\kappa-\mu} \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \mu \end{bmatrix}. \quad (33a)$$

Annak feltétele, hogy Z_π az Y_β -t annak reciprokába transzformálja, az Y -nak megfelelő mátrix valós ortogonális voltát felhasználva így írható:

$$\begin{pmatrix} j & Z_\pi \\ \kappa & \lambda \end{pmatrix} \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \lambda & \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \lambda & \kappa \end{bmatrix} \begin{pmatrix} j & Z_\pi \\ \lambda & \mu \end{pmatrix}$$

vagy

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} = (-1)^{\kappa-\mu} \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \mu & \kappa \end{bmatrix} \quad (33b)$$

és

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ -\mu & -\kappa \end{bmatrix}. \quad (33c)$$

Fennáll továbbá:

$$Y_\beta = Y_\pi(Y_{\pi-\beta})^{-1},$$

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & Y_\pi \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Y_{\pi-\beta} \\ \lambda & \mu \end{bmatrix}$$

vagy

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = (-1)^{j-\kappa} \begin{bmatrix} j & Y_{\pi-\beta} \\ \lambda & -\kappa \end{bmatrix} = (-1)^{j+\lambda} \begin{bmatrix} j & Y_{\pi-\beta} \\ -\kappa & \lambda \end{bmatrix}. \quad (33d)$$

Mindezeket a képleteket itt csak a könnyebb hivatkozás kedvéért írtuk fel. Azokat természetesen közvetlenül le lehet vezetni (30a)-ból; illusztrációként szolgál továbbá a táblázat a 12. szakasz végén, mely megad néhányat az Y_β -nak megfelelő mátrixok közül $\beta = \frac{1}{2}\pi$ esetére.

8. A háromdimenziós forgáscsoport egyszerűen reducibilis. Most szeretnénk megmutatni, hogy az ¹ alatt idézett dolgozat lemmája és 3. tétele érvényes az unimoduláris unitér csoportra.

A lemma érvényessége abból következik, hogy mind Frobenius és Schur megfontolásai, amelyeket felhasználtunk a lemma leszámaztatásához, mind pedig maga a levezetés, elvégezhető annak feltételezése nélkül is, hogy az alapulvett csoport

véges. Ekkor a $j = \frac{1}{2}$ ábrázolás fél-egész jellegéből és a Kronecker-szorzat fent leírt szerkezetéből következik, hogy — amint azt jól tudjuk — azok az ábrázolások, amelyeket j fél-egész számértéke jellemez (és így dimenziójuk páros), fél-egész ábrázolások, ha pedig j számértéke egész (a dimenzió páratlan), egész ábrázolással van dolgunk.

Ahhoz, hogy az ábrázolások páros vagy páratlan jellegét meghatározzuk, először meg kell mutatnunk, hogy a $j = 2j', 2j' - 2, 2j' - 4, \dots$ ábrázolások benne foglaltatnak a j' ábrázolás önmagával képezett $j' \times j'$ Kronecker-szorzatának $j' \times j'$ szimmetrikus részében; a $j = 2j' - 1, 2j' - 3, \dots$ ábrázolások pedig a $j' \times j'$ szorzat $j' \times j'$ antiszimmetrikus részében foglaltatnak. Ez a kijelentés nyilvánvalóan helytálló, ha $j' = 0$. Ugyancsak igaz $j' = \frac{1}{2}$ esetén, amikor $j' \times j'$ -nek háromdimenziósna ($j = 1$), míg $j' \times j'$ -nek egydimenziósna ($j = 0$) kell lennie. Feltételezve a fenti szerkezetet j -nek minden $j \leq j'$ értékére, most kimutatjuk $j' + \frac{1}{2}$ -re is, ami érvényességét általánossá teszi.

Vegyük szemügyre ($j' \times \frac{1}{2}$) önmagával képezett Kronecker-szorzatának a szimmetrikus részét. Kapjuk:⁸

$$(j' \times \frac{1}{2}) \times (j' \times \frac{1}{2}) = [(j' + \frac{1}{2}) + (j' - \frac{1}{2})] \times [(j' + \frac{1}{2}) + (j' - \frac{1}{2})]. \quad (34)$$

A jobboldal átlósösszege az ¹ dolgozat (17) képlete szerint megegyezik

$$(j' + \frac{1}{2}) \times (j' + \frac{1}{2}) + (j' + \frac{1}{2}) \times (j' - \frac{1}{2}) + (j' - \frac{1}{2}) \times (j' - \frac{1}{2})$$

átlósösszegével; az tehát ekvivalens a következő ábrázolások összegével:

$$(j' + \frac{1}{2}) \times (j' + \frac{1}{2}), 2j', 2j' - 1, 2j' - 2, 2j' - 3, 2j' - 4, 2j' - 5, \dots$$

$$2j' - 1, \quad 2j' - 3, \quad 2j' - 5, \dots \quad (34a)$$

Másrésről, ugyanezen egyenlet segítségével könnyen meggyőződhetünk arról, hogy $(j' \times \frac{1}{2}) \times (j' \times \frac{1}{2})$ átlósösszege egyenlő

$$(j' \times j') \times (\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}) + (j' \times j') \times (\frac{1}{2} \times \frac{1}{2})$$

átlósösszegével, ami pedig feltevésünk szerint egyenlő a következőkkel:

$$[(2j') + (2j' - 2) + (2j' - 4) \dots] \times (1) + [(2j' - 1) + (2j' - 3) + (2j' - 5) \dots] \times (0) =$$

$$= [(2j' + 1) + (2j') + (2j' - 1)] + [(2j' - 1) + (2j' - 2)$$

$$+ (2j' - 3)] + [(2j' - 3) \dots$$

$$+ (2j' - 3) \dots \quad (34b)$$

Összehasonlítva egymással a (34a), (34b) képleteket láthatjuk, hogy $(j' + \frac{1}{2}) \times (j' + \frac{1}{2})$ a $j = (2j' + 1), (2j' - 1), (2j' - 3), \dots$ ábrázolásokat foglalja magában, ami éppen a kívánt eredmény.

Ebből következik, hogy egész j' esetén a $2j', 2j' - 2, 2j' - 4, \dots$ ábrázolások párosak, míg $2j' - 1, 2j' - 3, \dots$ páratlan reprezentációk. Ha j' fél-egész, az első

⁸ $(j' + \frac{1}{2}) + (j' - \frac{1}{2})$ a $j' + \frac{1}{2}$ és $j' - \frac{1}{2}$ ábrázolások összegét (azaz a $j' + \frac{1}{2}$ és $j' - \frac{1}{2}$ ábrázolásokat tartalmazó reducibilis ábrázolást) jelöli. Vö. F. D. Murnaghan ⁷ alatt idézett művével.

sorozat páratlan és a második sorozat páros ábrázolásokból áll; ha a j ábrázolás egész, úgy az páros j esetén páros, páratlan j esetén páratlan. Nincs tehát olyan ábrázolás, mely egyszerre volna páros és páratlan, összhangban a 3. tétellel, melynek igazságáról meg kellett győződnünk. Az E. R. csoportok ábrázolásai számára a fél-egész, egész, páratlan és páros megjelölést oly módon választottuk, hogy j számértékének fél-egész, egész, páratlan és páros volta megegyezzek a neki megfelelő ábrázolás jellegével.

Ami $(-1)^j$ definícióját illeti (vö. 2. szakasz), a

$$(-1)^j = i^{2j} \quad (35)$$

megállapodást vesszük alapul. Megjegyezzük azonban, hogy a $(-1)^j = (-i)^{2j}$ megállapodás azonos alakú képletekhez vezetne, mivel -1 kitevője valamennyi egyenletben egész szám.

9. *A három- j -szimbólumok a háromdimenziós forgáscsoport esetében.* Néhány egyszerű összefüggés azonnal következik a fenti normálásból s a három- j -szimbólumok (2), (2a) definíciójából. A (2a) képletben R helyére Z_α -t írva, (30) és (2a) alapján kapjuk:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} e^{i(\lambda_1 + \lambda_2)\alpha} = e^{-i\lambda_3\alpha} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix},$$

vagyis

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} = 0, \quad \text{kivéve, ha } \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0. \quad (36)$$

Ha pedig (2a)-ba $R = Y_{-\pi}$ -t írjuk be, kapjuk:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -\lambda_1 & -\lambda_2 & \kappa_3 \end{pmatrix} (-1)^{j_1 - \lambda_1 + j_2 - \lambda_2} = (-1)^{j_3 + \kappa_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & -\kappa_3 \end{pmatrix}$$

vagy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -\lambda_1 & -\lambda_2 & -\lambda_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} (-1)^{j_1 + j_2 + j_3}, \quad (36a)$$

minthogy egész $j_3 + \kappa_3$ mellett $(-1)^{j_3 + \kappa_3} = (-1)^{-j_3 - \kappa_3}$ s minthogy a három- j -szimbólum eltűnik, hacsak $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$ nem zérus.

Végül (11a) és (32a) mutatja, hogy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}^* = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -\lambda_1 & -\lambda_2 & -\lambda_3 \end{pmatrix},$$

úgyhogy az alapul vett normálás mellett a három- j -szimbólumok valóságosak.

A (30b) képletből s az ábrázolási mátrixelemekre vonatkozó jólismert ortogonalitási összefüggésekből következik, hogy

$$\int \left| \begin{pmatrix} j & R \\ j & \lambda \end{pmatrix} \right|^2 dR = \frac{(2j)!}{(j-\lambda)!(j+\lambda)!} \int \cos^{2j+2\lambda} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\lambda} \frac{1}{2} \beta dR = \frac{h}{2j+1}, \quad (37)$$

ahol $h = \int dR$ a csoport térfogata. Így tehát (5), (30b), (33a) folytán kapjuk:

$$\begin{aligned} h \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_2 & j_2 - j_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda & -\lambda + j_3 & -j_3 \end{pmatrix} &= \int \begin{bmatrix} j_1 & R \\ j_1 & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & R \\ -j_2 & -\lambda + j_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & R \\ j_2 - j_1 & -j_3 \end{bmatrix} dR = \\ &= (-1)^{j_2 + j_3 - \lambda} \frac{[(2j_1)!(2j_2)!(2j_3)!]^{\frac{1}{2}} \int \cos^{2j_1 + 2\lambda} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j_2 + 2j_3 - 2\lambda} \frac{1}{2} \beta dR}{[(j_1 - \lambda)!(j_1 + \lambda)!(j_2 - j_3 + \lambda)!(j_2 + j_3 - \lambda)!(j_3 - j_2 + j_1)!(j_3 + j_2 - j_1)!]^{\frac{1}{2}}} = \\ &= \frac{(-1)^{j_2 + j_3 - \lambda} [(2j_1)!(2j_2)!(2j_3)!]^{\frac{1}{2}} (j_1 + \lambda)!(j_2 + j_3 - \lambda)! h}{[(j_1 - \lambda)!(j_1 + \lambda)!(j_2 - j_3 + \lambda)!(j_2 + j_3 - \lambda)!(j_3 - j_2 + j_1)!(j_3 + j_2 - j_1)!]^{\frac{1}{2}} (j_1 + j_2 + j_3 + 1)!}. \end{aligned} \quad (37a)$$

Ha itt $\lambda = j_1$, a

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_2 & j_2 - j_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ j_1 & -j_3 & j_3 - j_1 \end{pmatrix} &= \\ &= \frac{(-1)^{2j_1} (2j_1)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!} \left[\frac{(2j_2)!(2j_3)!}{(j_1 + j_2 - j_3)!(j_1 - j_2 + j_3)!} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (37b)$$

összefüggést nyerjük. Ez az egyenlet mutatja, hogy ha az első tényezőt a $(-1)^{2j_3}$ előjellel látjuk el (amit még szabadon megtehetünk), a második tényező előjele automatikusan $(-1)^{2j_2}$ lesz, minthogy $(-1)^{2j_1} = (-1)^{2j_2 + 2j_3}$. A (6) és (36a) képletek folytán $(-1)^{2j_3}$ lesz az előjele annak a három- j -szimbólumnak is, amelyet úgy kapunk, hogy j_1 -et és j_2 -t felcseréljük (37b) első tényezőjében. A (37b)-ből a j_1, j_2, j_3 indexek ciklikus permutációjával nyert egyenletek azt mutatják, hogy a fenti megállapodás érvényes lesz mindazon három- j -szimbólumokra, amelyeket a (37b) baloldalán álló három- j -szimbólumokból a j indexek tetszőleges felcserélésével kapunk. A három- j -szimbólumok előjelének ez a normálása továbbá megőrzi (7) és (32) érvényességét is. A következőkben ezt vesszük alapul. Abból a célból, hogy külön megkapjuk (37b) első tényezőjének az értékét, a j indexekre ciklikus permutációt alkalmazhatunk; a kapott egyenletet ezután szorozzuk meg (37b)-vel. Elosztva ezt a szorzatot azzal az egyenlettel, amelyet (37b)-ből a j indexek másik ciklikus permutációjának alkalmazásával kapunk, olyan egyenletet nyerünk, amely a (37b)-beli három- j -szimbólumok közül csak az egyiknek a négyzetét tartalmazza. Így módon kapjuk:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_2 & j_2 - j_1 \end{pmatrix} = (-1)^{2j_3} \left[\frac{(2j_1)!(2j_2)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!(j_1 + j_2 - j_3)!} \right]^{\frac{1}{2}}; \quad (37c)$$

(37a) most a

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda & j_3 - \lambda & -j_3 \end{pmatrix} &= \\ &= \frac{(-1)^{j_2 - j_3 - \lambda} [(2j_3)!(j_1 + j_2 - j_3)!(j_1 + \lambda)!(j_2 + j_3 - \lambda)!]^{\frac{1}{2}}}{[(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!(-j_1 + j_2 + j_3)!(j_1 - j_2 + j_3)!(j_1 - \lambda)!(j_2 - j_3 + \lambda)!]^{\frac{1}{2}}} \end{aligned} \quad (37d)$$

egyenletet szolgáltatja. Innen közvetlenül megkaphatjuk mindazokat a három- j -szimbólumokat, amelyekben a j egyenlő $\frac{1}{2}$ -del. Kapjuk tehát:

$$\begin{pmatrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \lambda & \frac{1}{2}-\lambda & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-\lambda}(j+1-\lambda)^{\frac{1}{2}}}{[(2j+1)(2j+2)]^{\frac{1}{2}}}. \quad (37e)$$

10. *A Racah-együtthatók kiszámítása.* Most rátérünk a hat- j -szimbólumok kiszámítására. Minthogy ezek függetlenek attól, hogy az ábrázolások számára milyen speciális alakot feltételezünk, kiszámításuknak közvetlen úton is lehetségesnek kell lennie. Azaz: a hat- j -szimbólumokat ki kell tudnunk számítani anélkül, hogy előbb a három- j -szimbólumokat kiszámítanánk. Ezt valóban megtehetjük, pl. a következő módon.

Először is megjegyezhetjük, hogy a (20) ortogonalitási összefüggések közvetlenül megadják azokat a hat- j -szimbólumokat, amelyek esetében a (20a) ortogonális mátrix egydimenziós. Ez a helyzet pl. akkor, ha $j_2+j_4 = \pm(j_1-j_3)$ vagy $\pm(j_2-j_4) = \pm(j_1+j_3)$. Ha $j_3=\frac{1}{2}$, a (20a) ortogonális mátrixnak — ha az történetesen nem egydimenziós — csak két sora és két oszlopa van, s így az egymással szemben elhelyezkedő elemei egyenlők, eltekintve az előjeltől. Eszerint pl.

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_4 - \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & j_4 & j_2 - \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} (2j_2 \cdot 2j_4)^{\frac{1}{2}} = \pm \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_4 + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & j_4 & j_2 + \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} ((2j_2+2)(2j_4+2))^{\frac{1}{2}},$$

ami a (19a) egyenlettel együtt lehetővé teszi, hogy j_2 és j_4 értékét egyaránt csökkentjük $\frac{1}{2}$ -del. Ezt az eljárást követhetjük mindaddig, amíg j_2+j_4 egyenlő nem lesz $j_1-\frac{1}{2}$ -del; az ily módon kapott hat- j -szimbólumot megadja első megjegyzésünk. A többi, $j_3=\frac{1}{2}$ -hez tartozó hat- j -szimbólum hasonló módon számítható ki. Ha ezt elvégeztük, a fennmaradó hat- j -szimbólumok kiszámítása a jelen szakasz vége felé leírt módon történhet.

Annak, hogy a fent vázolt eljárást nem fogjuk követni, az az oka, hogy az csak a hat- j -szimbólumok abszolút értékét adja meg. Másrésztől az előjelek meghatározása nem végezhető el elegánsan. Némelyek közülük önkényesen választhatók, amint azt a 6. szakasz kezdetén említettük. Miután ez megtörtént, a fennmaradó előjelek a fenti ortogonalitási összefüggések segítségével kaphatók meg, alkalmanként hivatkozva a (21a) képletre. Az egész tárgyalás azonban meglehetősen nehézkessé válik. A következő számításban ezért fel fogjuk használni az előző szakasz eredményeit.

Ha a

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}$$

hat- j -szimbólum zérustól különböző, a

$$\begin{aligned} J &= j_1+j_2+j_3, & J_1 &= j_1+l_2+l_3, \\ J_2 &= l_1+j_2+l_3, & J_3 &= l_1+l_2+j_3 \end{aligned} \quad (38)$$

számoknak egész számoknak kell lenniök. Minthogy ezek a következő képletekben gyakran fel fognak lépni, használni fogjuk fenti rövid jelölésüket. A (22) egyenlet általános képletet foglal magában a hat- j -szimbólumokra vonatkozóan. Ha i_1 helyére j_1 -et, i_2 helyére $-j_2$ -t és i_3 helyére $j_2 - j_1$ -et helyettesítjük be, meglehetősen egyszerű kifejezést kapunk a hat- j -szimbólumokra. Az $i_1 + i_2 = j_3$ esetben előnyösebb az $i_3 = j_3$ és $i_1 = -j_1$ vagy $i_2 = -j_2$ helyettesítés. A (37c), (37d) képletek figyelembevételével kapjuk:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3}.$$

$$\cdot \left[\frac{(J+1)!(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J_1-2l_2)!(J_2-2l_1)!(2l_1)!(2l_2)!}{(J_1+1)!(J_2+1)!(J-2j_3)!(J_1-2j_1)!(J_2-2j_2)!(J_1-2l_3)!(J_2-2l_3)!(2j_3+1)!} \right]^{\frac{1}{2}},$$

ha

$$l_1 + l_2 = j_3. \quad (39)$$

Ez az egyenlet közvetlenül megadja mindazokat a hat- j -szimbólumokat, amelyekben az ábrázolási indexek valamelyike $j=0$ vagy $j=\frac{1}{2}$. Ha $l_1=0$, szükségképpen $l_2=j_3$ és $l_3=j_2$; egyébként eltűnik a hat- j -szimbólum. Kapjuk:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & j_3 & j_2 \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} [(2j_2+1)(2j_3+1)]^{-\frac{1}{2}}. \quad (39a)$$

Ez megegyezik (18b)-vel és így független a 9. szakaszban alapul vett normálástól.

Az $l_1 = \frac{1}{2}$ esetben meg kell különböztetnünk két esetet:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} & j_2 + \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \left[\frac{(J-2j_2)(J-2j_3+1)}{(2j_2+1)(2j_2+2)2j_3(2j_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (39b)$$

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} & j_2 - \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \left[\frac{(J+1)(J-2j_1)}{2j_2(2j_2+1)2j_3(2j_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (39c)$$

Végül megjegyezzük, hogy

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \frac{1}{2}J-j_1 & \frac{1}{2}J-j_2 & \frac{1}{2}J-j_3 \end{matrix} \right\} = (-1)^J \left[\frac{(J+1)!(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!}{(2j_1+1)!(2j_2+1)!(2j_3+1)!} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (40)$$

A hat- j -szimbólumokra rekurziós képletet kaphatunk, ha a $k_2 = \frac{1}{2}$, $k_1 = j_3 - \frac{1}{2}$, $k_3 = j_1 - \frac{1}{2}$ értékeket helyettesítjük be a (26b) egyenletbe. Mind k , mind pedig l két értéket vehet fel: az $l_3 \pm \frac{1}{2}$, ill. $l_1 \pm \frac{1}{2}$ értékeket, a hat- j -szimbólum pedig négy hat- j -szimbólum összege alakjában jelenik meg, melyekben j_1 és j_3 egykettővel

kisebbség, mint az eredeti hat- j -szimbólumban:

$$\begin{aligned}
 & \frac{(2l_1+1)(2l_3+1)[(J+1)(J-2j_2)]^{\frac{1}{2}}}{[(J_1-2l_2)(J_1-2l_3)(J_3-2l_1)(J_3-2l_2)]^{\frac{1}{2}}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \\
 = & - \left[\frac{J_1+1}{J_1-2l_3} (J_2+1)(J_2-2j_2) \frac{J_3+1}{J_3-2l_1} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & j_2 & j_3-\frac{1}{2} \\ l_1-\frac{1}{2} & l_2 & l_3-\frac{1}{2} \end{Bmatrix} - \\
 & - \left[\frac{J_1-2j_1+1}{J_1-2l_2} (J_2-2l_1+1)(J_2-2l_3) \frac{J_3+1}{J_3-2l_1} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & j_2 & j_3-\frac{1}{2} \\ l_1-\frac{1}{2} & l_2 & l_3+\frac{1}{2} \end{Bmatrix} - \\
 & - \left[\frac{J_1+1}{J_1-2l_3} (J_2-2l_1)(J_2-2l_3+1) \frac{J_3-2j_3+1}{J_3-2l_2} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & j_2 & j_3-\frac{1}{2} \\ l_1+\frac{1}{2} & l_2 & l_3-\frac{1}{2} \end{Bmatrix} + \\
 & + \left[\frac{J_1-2j_1+1}{J_1-2l_2} (J_2+2)(J_2-2j_2+1) \frac{J_3-2j_3+1}{J_3-2l_2} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & j_2 & j_3-\frac{1}{2} \\ l_1+\frac{1}{2} & l_2 & l_3+\frac{1}{2} \end{Bmatrix}. \quad (41)
 \end{aligned}$$

Ez a képlet természetesen csak akkor érvényes, ha $J-2j_2 = j_1-j_2+j_3 > 0$. Ez lehetővé teszi, hogy addig csökkentjük a hat- j -szimbólumban fellépő j -ket, míg az olyan alakot nem ölt, amelyre a (39a), (39b), (39c) egyenletek valamelyike alkalmazható. Az alábbi táblázatokat így módon kaptuk. A numerikus táblázatok speciálisan illusztrálják az ortogonalitási összefüggéseket: az egyes táblázatok, ha mátrixnak tekintjük őket, a $((2j+1)(2l+1))^{\frac{1}{2}}$ súlyfaktossal ellátva ortogonálisak. Megemlítjük, hogy ez az összes hat- j -szimbólum szukcesszív kiszámítását ugyancsak lehetővé teszi.

$$\begin{aligned}
 & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3-1 & j_2-1 \end{Bmatrix} = \\
 = & (-1)^{j_1+j_2+j_3} \left[\frac{J(J+1)(J-2j_1-1)(J-2j_1)}{(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)(2j_3-1)2j_3(2j_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (42a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3-1 & j_2 \end{Bmatrix} = \\
 = & (-1)^{j_1+j_2+j_3} \left[\frac{2(J+1)(J-2j_1)(J-2j_2)(J-2j_3+1)}{2j_2(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_3-1)2j_3(2j_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (42b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3-1 & j_2+1 \end{Bmatrix} = \\
 = & (-1)^{j_1+j_2+j_3} \left[\frac{(J-2j_2-1)(J-2j_2)(J-2j_3+1)(J-2j_3+2)}{(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_2+3)(2j_3-1)2j_3(2j_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (42c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3 & j_2 \end{Bmatrix} = \\
 = & (-1)^{j_1+j_2+j_3} \frac{2(j_1^2+j_1-j_2^2-j_2-j_3^2-j_3)}{[2j_2(2j_2+1)(2j_2+2)2j_3(2j_3+1)(2j_3+2)]^{\frac{1}{2}}}. \quad (42d)
 \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{matrix} 3/2 & 3/2 & j \\ 3/2 & 3/2 & l \end{matrix} \right\} \text{ táblázata:}$$

$\begin{matrix} j \\ l \end{matrix}$	0	1	2	3
0	$-1/4$	$1/4$	$-1/4$	$1/4$
1	$1/4$	$-11/60$	$1/20$	$3/20$
2	$-1/4$	$1/20$	$3/20$	$1/20$
3	$1/4$	$3/20$	$1/20$	$1/140$

$$\left\{ \begin{matrix} 3/2 & 3/2 & j \\ 2 & 2 & l \end{matrix} \right\} \text{ táblázata:}$$

$\begin{matrix} j \\ l \end{matrix}$	0	1	2	3
$\frac{1}{2}$	$\frac{5^{\frac{1}{2}}}{10}$	$-\frac{18^{\frac{1}{2}}}{20}$	$\frac{14^{\frac{1}{2}}}{20}$	$-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{10}$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{5^{\frac{1}{2}}}{10}$	$\frac{2^{\frac{1}{2}}}{10}$	0	$-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{10}$
$\frac{5}{2}$	$\frac{5^{\frac{1}{2}}}{10}$	$-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{60}$	$-\frac{14^{\frac{1}{2}}}{28}$	$-\frac{18^{\frac{1}{2}}}{70}$
$\frac{7}{2}$	$-\frac{5^{\frac{1}{2}}}{10}$	$-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{10}$	$-\frac{14^{\frac{1}{2}}}{70}$	$-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{140}$

$$\left\{ \begin{matrix} 3/2 & 2 & j \\ 3/2 & 2 & l \end{matrix} \right\} \text{ táblázata:}$$

$\begin{matrix} j \\ l \end{matrix}$	1/2	3/2	5/2	7/2
1/2	$1/20$	$-1/10$	$3/20$	$-1/5$
3/2	$-1/10$	$3/20$	$-1/10$	$-1/10$
5/2	$3/20$	$-1/10$	$-47/420$	$-1/35$
7/2	$-1/5$	$-1/10$	$-1/35$	$-1/280$

$\left\{ \begin{smallmatrix} 2 & 2 & l \\ 2 & 2 & j \end{smallmatrix} \right\}$ táblázata:

$i \backslash j$	0	1	2	3	4
0	1/5	-1/5	1/5	-1/5	1/5
1	-1/5	1/6	-1/10	0	2/15
2	1/5	-1/10	-3/70	4/35	2/35
3	-1/5	0	4/35	1/14	1/70
4	1/5	2/15	2/35	2/70	1/630

11. *A három- j -szimbólumok kiszámítása.* Azok a három- j -szimbólumok, amelyekben az egyik j egyenlő a másik kettő összegével, meglehetősen egyszerűen kaphatók a (2a) képletből. Ha abba behelyettesítjük a $-\kappa_3 = j_3 = j_1 + j_2$ értéket, a baloldalon csak a $\kappa_1 = j_1$, $\kappa_2 = j_2$ tag marad. Az ábrázolási együtthatók valamenynyien a (30b) alakúak, vagy (33a) segítségével ilyen alakra hozhatók. A (37c) képlet segítségével kapjuk:

$$\begin{aligned} & \left(\begin{smallmatrix} j_1 & j_2 & j_1+j_2 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & -\lambda_1-\lambda_2 \end{smallmatrix} \right) = \\ & = (-1)^{j_1-j_2+\lambda_1+\lambda_2} \cdot \left[\frac{(2j_1)!(2j_2)!(j_1+j_2+\lambda_1+\lambda_2)!(j_1+j_2-\lambda_1-\lambda_2)!}{(2j_1+2j_2+1)!(j_1+\lambda_1)!(j_1-\lambda_1)!(j_2+\lambda_2)!(j_2-\lambda_2)!} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (43) \end{aligned}$$

Ez az összefüggés (39d)-vel, (32a)-val és (22)-vel együtt általános képletet ad meg a három- j -szimbólumokra vonatkozóan. Helyettesítsük ebből a célból a (22) képletben l_1 -et $\frac{1}{2}J - j_1$ -gyel, l_2 -t $\frac{1}{2}J - j_2$ -vel, l_3 -at pedig $\frac{1}{2}J - j_3$ -mal; ekkor a jobboldalon minden három- j -szimbólum a (43) alakot nyeri. Ily módon kapjuk:

$$\begin{aligned} \left(\begin{smallmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{smallmatrix} \right) &= \sum_{\kappa_1 \kappa_2 \kappa_3} \frac{(-1)^{\kappa_1+\kappa_2+\kappa_3-\frac{1}{2}J} [(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!]^{\frac{1}{2}}}{[(J+1)!]^{\frac{1}{2}} (\frac{1}{2}J-j_1-\kappa_1)! (\frac{1}{2}J-j_1+\kappa_1)!} \\ & \cdot \frac{[(j_1-\lambda_1)!(j_1+\lambda_1)!(j_2-\lambda_2)!(j_2+\lambda_2)!(j_3-\lambda_3)!(j_3+\lambda_3)!]^{\frac{1}{2}}}{(\frac{1}{2}J-j_2-\kappa_2)! (\frac{1}{2}J-j_2+\kappa_2)! (\frac{1}{2}J-j_3-\kappa_3)! (\frac{1}{2}J-j_3+\kappa_3)!}, \quad (44) \\ & \kappa_3 - \kappa_2 = \lambda_1, \quad \kappa_1 - \kappa_3 = \lambda_2, \quad \kappa_2 - \kappa_1 = \lambda_3. \end{aligned}$$

Az összegezés valójában csak egy indexre történik, mivel az utolsó sor mind a három κ -t meghatározza, ha egyikük meg van adva. Az összegezés $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ mindazon értékeire kiterjesztendő, amelyek összeférnek (44) utolsó sorával és amelyekre a nevezőben álló összes faktoriális nemnegatív egész. A (44) egyenlet lényegében véve megegyezik a ⁴ alatt idézett mű XVII. fejezetének (27) egyenletével. Meg lehet mutatni, hogy a kapcsolat s és a mi három- j -szimbólumunk között a következő:

$$s_{\mathcal{L}\mu\nu}^{(l)} = (-1)^{l-l+\mu+\nu} (2\mathcal{L}+1)^{\frac{1}{2}} \left(\begin{smallmatrix} l & l & \mathcal{L} \\ \mu & \nu & -\mu-\nu \end{smallmatrix} \right). \quad (44a)$$

A három- j -szimbólumok számára (22)-ből rekurziós képletet kaphatunk, mely hasonlít (41)-re, de sokkal könnyebben kezelhető. Ha a (22) képletbe az $l_1 = \frac{1}{2}$, $l_2 = j_3 - \frac{1}{2}$, $l_3 = j_2 - \frac{1}{2}$ értékeket helyettesítjük, mindazok a szimbólumok, amelyekben l_1 fellép, közvetlenül kifejezhetők (37e) és (39c), az egy- j -szimbólumok pedig (32a) segítségével. Az összegnek csupán két tagja marad, melyek $\lambda_1 = \pm \frac{1}{2}$ -nek felelnek meg. Így módon kapjuk:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ i_1 & i_2 & i_3 \end{pmatrix} = - \left[\frac{(j_2 - i_2)(j_3 + i_3)}{(J+1)(J-2j_1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 - \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} \\ i_1 & i_2 + \frac{1}{2} & i_3 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \\ + \left[\frac{(j_2 + i_2)(j_3 - i_3)}{(J+1)(J-2j_1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 - \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} \\ i_1 & i_2 - \frac{1}{2} & i_3 + \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (45)$$

Az alábbi táblázatban⁵ megadott három- j -szimbólumokat ezen képlet és (37e) segítségével számítottuk ki. Minthogy a három- j -szimbólum eltűnik, hacsak a görög indexek összege nem zérus, mindazokat a szimbólumokat, amelyek a j indexek ugyanazon értékeihez tartoznak, megadhatjuk egyetlen ábra segítségével. Az ábra középpontja az $i_1 = i_2 = i_3 = 0$ értékeknek felel meg — feltéve, hogy mindegyik j egész; i_1 a vízszintes, i_2 a 60° -os irányban jobbra felfelé haladó, i_3 pedig a 60° -os irányban balra felfelé haladó sorok mentén konstans. Az egyes pontoknak megfelelő i_1, i_2, i_3 értékeket, ha mindegyik j egész, az első ábra adja meg; a második ábra azt az esetet mutatja, amikor i_1 és i_2 fél-egész (i_3 ennél fogva egész). Ebben az esetben az ábra középpontját a \otimes jel mutatja. A többi ábra a baloldalon felüntetett három- j -szimbólumok értékeit közli, analóg elrendezésben.

	— 220	— 211	— 202	
— 12 — 1		— 110	— 101	— 1 — 12
	01 — 1		000	0 — 11
11 — 2		10 — 1	1 — 10	1 — 21
	20 — 2		2 — 1 — 1	2 — 20
	$-\frac{3}{2} \frac{3}{2} 0$		$-\frac{3}{2} \frac{1}{2} 1$	$-\frac{3}{2} -\frac{1}{2} 2$
$-\frac{1}{2} \frac{3}{2} - 1$		$-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$		$-\frac{1}{2} -\frac{1}{2} 1$
		\otimes		
	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} - 1$		$\frac{1}{2} -\frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} -\frac{3}{2} 1$
$\frac{3}{2} \frac{1}{2} - 2$		$\frac{3}{2} -\frac{1}{2} - 1$		$\frac{3}{2} -\frac{3}{2} 0$

$$(0 \ j \ j) \quad \frac{(-1)^{2j}}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}}, \frac{(-1)^{2j-1}}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}}, \dots, \frac{-1}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}}, \frac{1}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}}$$

$(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1)$		$6^{-\frac{1}{2}}$		$-3^{-\frac{1}{2}}$	
			\otimes		
		$-3^{-\frac{1}{2}}$		$6^{-\frac{1}{2}}$	
$(\frac{1}{2} \frac{3}{2} 1)$	$-\frac{1}{2}$	$6^{-\frac{1}{2}}$		$-12^{-\frac{1}{2}}$	
			\otimes		
		$12^{-\frac{1}{2}}$		$-6^{-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{2}$
$(\frac{1}{2} \frac{3}{2} 2)$	$20^{-\frac{1}{2}}$	$-10^{-\frac{1}{2}}$		$(3/20)^{-\frac{1}{2}}$	$-5^{-\frac{1}{2}}$
			\otimes		
	$-5^{-\frac{1}{2}}$	$(3/20)^{\frac{1}{2}}$		$-10^{-\frac{1}{2}}$	$20^{-\frac{1}{2}}$
$(\frac{1}{2} \frac{5}{2} 2)$	$-6^{-\frac{1}{2}}$	$(2/15)^{\frac{1}{2}}$	$-10^{-\frac{1}{2}}$	$15^{-\frac{1}{2}}$	$-30^{-\frac{1}{2}}$
			\otimes		
	$30^{-\frac{1}{2}}$	$-15^{-\frac{1}{2}}$		$10^{-\frac{1}{2}}$	$-(2/15)^{-\frac{1}{2}}$
$(\frac{1}{2} \frac{5}{2} 3)$	$42^{-\frac{1}{2}}$	$-21^{-\frac{1}{2}}$	$14^{-\frac{1}{2}}$	$-(2/21)^{-\frac{1}{2}}$	$(5/42)^{\frac{1}{2}}$
			\otimes		
	$-7^{-\frac{1}{2}}$	$(5/42)^{\frac{1}{2}}$	$-(2/21)^{-\frac{1}{2}}$	$14^{-\frac{1}{2}}$	$-21^{-\frac{1}{2}}$
$(1 1 1)$		$-6^{-\frac{1}{2}}$	$6^{-\frac{1}{2}}$		
		$6^{-\frac{1}{2}}$	0	$-6^{-\frac{1}{2}}$	
		$-6^{-\frac{1}{2}}$	$6^{-\frac{1}{2}}$		
$(1 1 2)$	$30^{-\frac{1}{2}}$		$-10^{-\frac{1}{2}}$		$5^{-\frac{1}{2}}$
	$-10^{-\frac{1}{2}}$	$(2/15)^{\frac{1}{2}}$		$-10^{-\frac{1}{2}}$	
	$5^{-\frac{1}{2}}$	$-10^{-\frac{1}{2}}$		$30^{-\frac{1}{2}}$	
$(1 2 2)$	$-15^{-\frac{1}{2}}$	$10^{-\frac{1}{2}}$	$-10^{-\frac{1}{2}}$	$15^{-\frac{1}{2}}$	
	$(2/15)^{\frac{1}{2}}$	$-30^{-\frac{1}{2}}$	0	$30^{-\frac{1}{2}}$	$-(2/15)^{-\frac{1}{2}}$
	$-15^{-\frac{1}{2}}$	$10^{-\frac{1}{2}}$	$-10^{-\frac{1}{2}}$	$15^{-\frac{1}{2}}$	
$(1 2 3)$	$105^{-\frac{1}{2}}$	$-35^{-\frac{1}{2}}$	$(2/35)^{\frac{1}{2}}$	$-(2/21)^{\frac{1}{2}}$	$7^{-\frac{1}{2}}$
	$-21^{-\frac{1}{2}}$	$(8/105)^{\frac{1}{2}}$	$-(3/35)^{\frac{1}{2}}$	$(8/105)^{\frac{1}{2}}$	$-21^{-\frac{1}{2}}$
	$7^{-\frac{1}{2}}$	$-(2/21)^{\frac{1}{2}}$	$(2/35)^{\frac{1}{2}}$	$-35^{-\frac{1}{2}}$	$105^{-\frac{1}{2}}$

12. Az ábrázolási mátrixelemek kiszámítása. Végül magukat az ábrázolási mátrixelemeket megadó képletek tárgyalására térünk rá. A (30) egyenlet folytán ezek lényegében ekvivalensek az $R = Z_\alpha Y_\beta Z_\gamma$ -ban fellépő Y_β mátrixelemeire vonatkozó képletekkel.

Felhasználva a (2a) képletet $j_3 = j_1 + j_2$ mellett, (43) segítségével egyszerű kifejezést kapunk a fellépő három- j -szimbólumokra vonatkozóan; behelyettesíthetjük továbbá a $\lambda_1 = j_1$ értéket, hogy (30b) és (33b) segítségével egyszerű alakot kapjunk a j_1 ábrázolás mátrixelemére. Írjunk κ_3 helyett κ -t, κ_1 helyett ν -t és λ_2 helyett $-j_1 - \lambda$ -t; (33a) felhasználásával $\lambda < j_2 - j_1$ esetre kapjuk:

$$\begin{bmatrix} j_1 + j_2 & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \sum_{\nu} \frac{(2j_1)!}{(j_1 + \nu)!(j_1 - \nu)!} \left[\frac{(j_1 + j_2 - \kappa)!(j_1 + j_2 + \kappa)!(j_2 - j_1 - \lambda)!}{(j_2 - \nu - \kappa)!(j_2 + \nu + \kappa)!(j_2 + j_1 - \lambda)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \begin{bmatrix} j_2 & Y_\beta \\ \kappa + \nu & j_1 + \lambda \end{bmatrix} \cos^{j_1 + \nu \frac{1}{2}} \beta \sin^{j_1 - \nu \frac{1}{2}} \beta. \quad (46)$$

A ν -re vonatkozó összegezést, akárcsak az összes többi hasonló képletben, mindazokra az értékekre ki kell terjesztenünk, amelyek mellett a nevezőben csupa nem-negatív szám faktoriálisa fordul elő.

Specializáljuk ezt $j_1 = \frac{1}{2}$ esetre:

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j + \kappa \\ j - \lambda \end{bmatrix}^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} j - \frac{1}{2} & Y_\beta \\ \kappa - \frac{1}{2} & \lambda + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \sin^{\frac{1}{2}} \beta + \begin{bmatrix} j - \kappa \\ j - \lambda \end{bmatrix}^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} j - \frac{1}{2} & Y_\beta \\ \kappa + \frac{1}{2} & \lambda + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \cos^{\frac{1}{2}} \beta. \quad (46a)$$

Hasznos képletet kaptunk az ábrázolási mátrixelemek kiszámítására [kivételt képez a $\lambda = +j$ eset: ekkor pl. a (30b) képletet használhatjuk fel]; a (46) képlet ezzel szemben nagyobb lépéseket tesz lehetővé. A $j=1$ esetben a (46a) egyenlet segítségével könnyen kapjuk a

$$\begin{bmatrix} 1 & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -2^{-\frac{1}{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ 2^{-\frac{1}{2}} \sin \beta & \cos \beta & -2^{-\frac{1}{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & 2^{-\frac{1}{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{vmatrix} \quad (46b)$$

képletet (mindezekben a mátrixokban a sorok és az oszlopok rendje: $-j, -j+1, \dots, j-1, j$).

A (46), (46a) és (30a) egyenletek hátránya, hogy azok az ábrázolási mátrixelemeket $\cos^{\frac{1}{2}} \beta$ és $\sin^{\frac{1}{2}} \beta$ hatványai segítségével fejezik ki. E függvények általános viselkedése egyszerűbben szemléltethető, ha azokat β többszöröseinek szinusza és koszinusza segítségével adjuk meg. A (30) képletben Z_α mátrixelemei így vannak megadva. Ami Y_β -t illeti, abból a megjegyzésből indulhatunk ki, hogy Y_β egy osztályba tartozik Z_β -val s abból megkapható az

$$Y_\beta = X Z_\beta X^{-1} \quad (47)$$

képlet szerint, az

$$X = X_{\pi/2} = \begin{vmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & i2^{-\frac{1}{2}} \\ i2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \quad (47a)$$

mátrixszal elvégzett transzformáció útján. Így tehát

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & X_{\pi/2} \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Z_\beta \\ \mu & \mu' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & X_{\pi/2} \\ \lambda & \mu' \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} j & X_{\pi/2} \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & X_{\pi/2} \\ \lambda & \mu \end{bmatrix}^* e^{i\mu\beta}, \quad (47b)$$

ahol

$$\begin{bmatrix} j & X_{\pi/2} \\ \kappa & \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j & Z_{\pi/2} \\ \kappa & \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Y_{\pi/2} \\ \nu & \nu' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Z_{-\pi/2} \\ \nu' & \mu \end{bmatrix} = i^{\kappa-\mu} \begin{bmatrix} j & Y_{\pi/2} \\ \kappa & \mu \end{bmatrix}. \quad (47c)$$

Helyettesítsük ezt (47b)-be:

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = \sum_{\mu} \begin{bmatrix} j & Y \\ \mu & \kappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Y \\ \mu & \lambda \end{bmatrix} i^{\lambda-\kappa} e^{i\mu\beta}. \quad (48)$$

Látható, hogy elégséges az $Y = Y_{\pi/2}$ -t ábrázoló mátrixelemeket ismerni ahhoz, hogy megkapjuk a kívánt képletet tetszőleges Y_β mátrixelemeire. A (33d) képlet segítségével a μ -re vonatkozó összegezést ezen mennyiség nemnegatív értékeire korlátozhatjuk:

$$\begin{bmatrix} j & Y_\beta \\ \kappa & \lambda \end{bmatrix} = 2 \sum' \begin{bmatrix} j & Y \\ \mu & \kappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & Y \\ \mu & \lambda \end{bmatrix} tr\mu\beta, \quad (48a)$$

ahol a μ -re vonatkozó összegzés kiterjed ezen mennyiség összes pozitív értékeire, valamint — egy $\frac{1}{2}$ faktorial — a $\mu=0$ értékre, azonkívül

$$tr\mu\beta = \begin{cases} \cos \mu\beta, & \text{ha } \kappa - \lambda = 0 \pmod{4}, \\ \sin \mu\beta, & \text{ha } \kappa - \lambda = 1 \pmod{4}, \\ -\cos \mu\beta, & \text{ha } \kappa - \lambda = 2 \pmod{4}, \\ -\sin \mu\beta, & \text{ha } \kappa - \lambda = 3 \pmod{4}. \end{cases} \quad (48b)$$

A $\begin{bmatrix} j & Y \\ \mu & \kappa \end{bmatrix}$ mátrixelem kiszámítása könnyen elvégezhető (46a) segítségével, ha abba behelyettesítjük a $\sin \frac{1}{2} \beta = \cos \frac{1}{2} \beta = 2^{-\frac{1}{2}}$ értékeket; segítséget nyújtanak továbbá ehhez a számításhoz a (33) összefüggések. Az első néhány mátrix:

$$2^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}; \quad 2^{-1} \begin{vmatrix} 1 & -2^{\frac{1}{2}} & 1 \\ 2^{\frac{1}{2}} & 0 & -2^{\frac{1}{2}} \\ 1 & 2^{\frac{1}{2}} & 1 \end{vmatrix};$$

$$2^{-\frac{3}{2}} \begin{vmatrix} 1 & -3^{\frac{1}{2}} & 3^{\frac{1}{2}} & -1 \\ 3^{\frac{1}{2}} & -1 & -1 & 3^{\frac{1}{2}} \\ 3^{\frac{1}{2}} & 1 & -1 & -3^{\frac{1}{2}} \\ 1 & 3^{\frac{1}{2}} & 3^{\frac{1}{2}} & 1 \end{vmatrix};$$

$$2^{-2} \begin{vmatrix} 1 & -2 & 6^{\frac{1}{2}} & -2 & 1 \\ 2 & -2 & 0 & 2 & -2 \\ 6^{\frac{1}{2}} & 0 & -2 & 0 & 6^{\frac{1}{2}} \\ 2 & 2 & 0 & -2 & -2 \\ 1 & 2 & 6^{\frac{1}{2}} & 2 & 1 \end{vmatrix}.$$

III. Alkalmazások a kvantummechanikára

13. *A Hilbert-tér mint ábrázolási terek egyesítése. Irreducibilis tenzorok.* Ebben a szakaszban az előző szakaszok folyamán tárgyalt fogalmaknak a kvantummechanikában előforduló alkalmazásait tekintjük át. Minthogy ezen alkalmazások szempontjából szükségtelen, hogy megnevezzük a csoportot, mellyel foglalkozunk (és amely az alapul vett probléma szimmetriacsoportja), képleteinkbe nem fogjuk behelyettesíteni a három- j -szimbólumoknak stb. az előző szakaszokban a forgáscsoport számára kapott értékeit. Ugyanezen okból nem feltételezzük azt sem, hogy a három- j -szimbólumok és az egy- j -szimbólumok valósak, bár ez az alkalmazásokban gyakorlatilag mindig igaz.

A kvantummechanikában a különböző ábrázolási tereket egyetlen Hilbert-térre egyesítjük. A kvantumelmélet Hilbert-tere a valóságban rendszerint olyan direkt összeg, amelyben az ábrázolási terek mindegyike végtelen sokszor fellép. Azonban a Hilbert-térnek gyakorlatilag minden vektora, mellyel dolgunk lesz, ezen ábrázolási terek egyikében vagy másikában fekszik, azaz: csupán egyetlen ilyen ábrázolási tér tengelyei mentén mért komponensei különböznek zérustól.

Minden egyes l ábrázolási térben bevezetjük a ψ_v^l ortogonális vektorok egy rendszerét. A 4. szakaszban használt jelölést itt kissé megváltoztattuk; ott ψ_v volt egy vektor v -edik komponense. A következőkben ψ_v^l egységvektort fog jelölni, mely az l ábrázolási térben foglal helyet. Ezen ábrázolási tér általános vektora

$$\varphi^l = a^{lv} \psi_v^l, \quad (49)$$

míg a Hilbert-tér általános vektora

$$\varphi = \sum_l a^{lv} \psi_v^l. \quad (49a)$$

A Hilbert-térben megadhatók olyan P_R lineáris unitér operátorok, amelyek lehetővé teszik, hogy kifejezzük ezen tér invarianciáját az alapul vett csoport R transzformációival szemben. Az egységvektorok transzformációs képlete:

$$P_R \psi_v^l = \begin{bmatrix} l & R \\ \mu & v \end{bmatrix} \psi_\mu^l, \quad (50)$$

azaz: a Hilbert-térben az ábrázolási terek invariánsak a P_R operátorokkal szemben. Az (50) egyenlet összhangban áll az általános kovariáns-kontravariáns formalizmussal: a (14) képletet követően megjegyeztük, hogy az ábrázolási mátrixelemek első indexe kontravariáns index.

Tekintettel arra, hogy P_R lineáris operátor, a (49) alatt megadott φ^l -re való alkalmazásának eredményeként kapjuk:

$$P_R \varphi^l = a^{lv} P_R \psi_v^l = a^{lv} \begin{bmatrix} R & l \\ \mu & v \end{bmatrix} \psi_\mu^l. \quad (51)$$

Ezen egyenlet alapján P_R mint az a^{lv} együtthatók transzformációja is értelmezhető:

$$a^{lv} \rightarrow \begin{bmatrix} l & R \\ \mu & v \end{bmatrix} a^{lv}. \quad (51a)$$

Ez az egyenlet azt a tényt fejezi ki, hogy a φ vektor a^{lv} kontravariáns komponensei a kontravariáns komponensek szokásos transzformációs törvényének megfelelően transzformálódnak.

Ha S a csoportnak valamely másik eleme, $P_S(P_R\psi_v^l)$ kiszámítása P lineáris voltának, valamint az (50) egyenletnek a felhasználásával történhet:

$$\begin{aligned} P_S(P_R\psi_v^l) &= P_S\left(\begin{bmatrix} l & R \\ \mu & v \end{bmatrix} \psi_\mu^l\right) = \begin{bmatrix} l & R \\ \mu & v \end{bmatrix} P_S\psi_\mu^l = \\ &= \begin{bmatrix} l & R \\ \mu & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l & S \\ \eta & \mu \end{bmatrix} \psi_\eta^l = \begin{bmatrix} l & SR \\ \eta & v \end{bmatrix} \psi_\eta^l = P_{SR}\psi_v^l. \end{aligned} \quad (52)$$

Hasonló egyenlet érvényes a φ általános vektorra is. Ebből következik, hogy

$$P_S P_R = P_{SR}. \quad (52a)$$

A kvantummechanikában jártas olvasó a Hilbert-térben rá fog ismerni az összes állapotvektor terére. A ψ_v^l vektorok rendszerint az energiaoperátor meghatározott sajátértékhez tartozó sajátfüggvényei; a (49) alatt felírt φ^l az ezen sajátértékhez tartozó általános sajátfüggvény. A H energiaoperátor a feltevés szerint invariáns az alapul vett csoport transzformációival szemben ($P_R H P_{R^{-1}} = H$) és H minden egyes sajátértékéhez ezen csoportnak egy-egy l ábrázolása tartozik. Rendszerint végtelen sok olyan sajátérték van, amelyhez egy adott l ábrázolás hozzátartozik, és az igaz minden l -re. Ez az ezen szakaszban korábban tett megjegyzés magyarázatául szolgál, amely szerint a Hilbert-tér általában olyan direkt összeg, amelyben az ábrázolási terek mindegyike végtelen sokszor lép fel.

A következő fontos fogalom a t_τ „ t -edrendű irreducibilis tenzor” fogalma, ahol τ a $-t$ -től t -ig terjedő értékeket futja be. A t_τ tenzoroperátorok a

$$P_R t_\tau P_{R^{-1}} = \begin{bmatrix} t & R \\ \sigma & \tau \end{bmatrix} t_\sigma \quad (53)$$

egyenletnek tesznek eleget, ami ugyancsak összhangban áll (52a)-val, minthogy

$$P_S P_R t_\tau P_{R^{-1}} P_{S^{-1}} = P_{SR} t_\tau P_{R^{-1}} P_{S^{-1}}.$$

Látható, hogy ezen definíció szerint a H energiaoperátor 0-adrendű irreducibilis tenzoroperátor (invariáns operátor), vagyis skalár, abban az esetben, ha $P_R H P_{R^{-1}} = H$ (ami — mint fent mondtuk — rendszerint teljesül).

Az egész rendű operátorok lehetnek hermitikusak. Valóban, ha feltesszük, hogy a t ábrázolás valós, (53) alapján közvetlenül látható, hogy a $P_R t_\tau P_{R^{-1}}$ komponensek hermitikusak, ha ez az eredeti t_τ komponensekre igaz. Ha az ábrázolást nem valós alakban kívánjuk feltételezni, úgy az egyes t_τ operátorok önadjungált voltát definiálni nem jár haszonnal; ilyenkor csak a t_τ operátorok ($-t \leq \tau \leq t$) összességének önadjungált voltáról hasznos beszélni. Ez minden esetre maga után vonja, hogy a t_τ operátor hermitikus adjungáltja lineáris kombinációja maguknak a t_τ operátoroknak:

$$t_\tau^+ = a_{\sigma\tau} t_\sigma. \quad (53a)$$

Ezt az egyenletet P_R segítségével transzformációnak alávetve azt találjuk, mivel

$P_R t_\tau^+ P_{R^{-1}} = (P_R t_\tau P_{R^{-1}})^+$, hogy a t ábrázolást a konjugált képzetes alakba $a_{\sigma\tau}$ transzformálja. Így tehát egy állandótól eltekintve $a_{\sigma\tau}$ -nak meg kell egyeznie a t ábrázoláshoz tartozó egy- j -szimbólummal; a t_τ operátorokat alkalmas állandóval megszorozva elérhető, hogy pontosan fennálljon a

$$t_\tau^+ = \begin{pmatrix} t \\ \sigma\tau \end{pmatrix}^* t_\sigma = t^\tau \quad (54)$$

összefüggés. A mi kovariáns-kontravariáns formalizmusunkban (54) azt mondja, hogy egy önadjungált tenzoroperátor kontravariáns komponense hermitikus adjungáltja a megfelelő kovariáns komponensnek.

Az (54) egyenletből következik, hogy fél-egész rendű tenzoroperátorok nem képezhetnek önadjungált rendszert, azaz nem elégíthetik ki az (53a) egyenletet. Ez kitűnik, ha képezzük (54) hermitikus adjungáltját és a jobb oldalon a t_σ^+ operátort kifejezzük magukkal a t_σ -kkal. Minthogy a t_σ -k szükségképpen lineárisan függetlenek, ez a t -nek megfelelő egy- j -szimbólumra a (10) összefüggést adja, azonban a $(-1)^{2t}$ tényező nélkül. Ebből következik, hogy $2t$ páros és t egész. Megjegyzendő, hogy a t_τ operátorok rendszerének önadjungált volta nem azt jelenti, hogy valamennyi t_τ maga hermitikus. Így pl. a forgáscsoport esetében csak t_0 hermitikus, és ez is csak akkor, ha t páros. Ha t páratlan, a t_0 operátor antihermitikus.

A legegyszerűbb tenzoroperátor nulladrendű. Ez a skalár; az 1 szám (vagy mint fent említettük, az energia operátora) példa erre. Nyilvánvaló, hogy az „ x -szel, y -nal és z -vel való szorzás” operátorainak lineárkombinációi elsőrendű tenzoroperátor — azaz vektoroperátor — komponenseit képezik. A következőkben explicit meghatározzuk ezeket a lineárkombinációkat. Következő számításunk egyben bizonyítani fogja (61) vektoroperátor-jellegét.

Legyen

$$\begin{aligned} v_{-1} &= s_{x-1}x + s_{y-1}y + s_{z-1}z, \\ v_0 &= s_{x0}x + s_{y0}y + s_{z0}z, \\ v_1 &= s_{x1}x + s_{y1}y + s_{z1}z. \end{aligned} \quad (55)$$

Az $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ jelöléssel (55) így rövidíthető:

$$v_\tau = \sum_a s_{a\tau} x_a. \quad (55a)$$

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy a

$$P_R f(x, y, z) = f(\Sigma R_{ax} x_a, \Sigma R_{ay} x_a, \Sigma R_{az} x_a) \quad (56)$$

vagy

$$P_R f(x) = f(R^{-1}x) \quad (56a)$$

definíció eleget tesz (52a)-nak. Az x_a operátorokra (az x_a -kkal való szorzásra) vonatkozóan innen következik:

$$P_R x_a P_{R^{-1}} = \sum_b R_{ba} x_b, \quad (57)$$

a v_τ komponensekre vonatkozóan pedig

$$P_R v_\tau P_{R^{-1}} = \sum_{ab} s_{a\tau} R_{ba} x_b. \quad (58)$$

Ezt (53)-mal kombinálva kapjuk:

$$\sum_{ab} R_{ba} s_{at} x_b = \begin{bmatrix} 1 & R \\ \sigma & \tau \end{bmatrix} v_\sigma = \sum_b \begin{bmatrix} 1 & R \\ \sigma & \tau \end{bmatrix} s_{b\sigma} x_b;$$

innen következik:

$$Rs = s[1; R], \quad (59)$$

ahol $[1; R]$ az a mátrix, amely az R csoportelemnek felel meg az l ábrázolásban. Eszerint s az a mátrix, amely R -et az $l=1$ ábrázolásba transzformálja.

Természetesen (59) szabadon hagy egy közös multiplikatív állandót valamennyi s -ben. Ez annak felel meg, hogy valamely tenzoroperátor ezt a jellegét nem veszíti el, ha mindegyik komponensét ugyanazon konstanssal megszorozzuk. Ezt a konstans oly módon fogjuk megválasztani, hogy a v komponensek önadjungált rendszert képezzenek az (54) értelemben; ez rögzíteni fogja a határozatlan konstans arkuszát. Az (59) egyenletet kielégítő s -et könnyűszerrel kiszámíthatjuk. Így ha $R = Z_\alpha$ a Z -tengely körül elvégzett elforgatás, az ábrázolást (30) adja meg, míg maga Z_α a következő alakú:

$$Z_\alpha = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (60)$$

Az (59) egyenlet ennek alapján az $s_{z-1} = s_{z1} = s_{x0} = s_{y0} = 0$; $s_{x-1} = is_{y-1}$; $s_{x1} = -is_{z1}$ összefüggéseket adja. Az $[1; Y_\beta]$ mátrix alakja (46b) alatt van megadva; a megfelelő Y_β -t (60)-ból ciklikus permutációval kaphatjuk meg. Az $s_{z0} = i$ normálás mellett így módon kapjuk:

$$\begin{aligned} v_{-1} &= 2^{-\frac{1}{2}} i(x - iy), \\ v_0 &= iz, \\ v_1 &= -2^{-\frac{1}{2}} i(x + iy). \end{aligned} \quad (61)$$

Ezek önadjungált rendszert képeznek. A vektoroperátorok egy másik hasonlóan fontos rendszerét képezik maguk az infinitezimális elforgatások. Legyen

$$M_a = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (P_{a(\varepsilon)} - 1), \quad (62)$$

ahol a az x, y, z tengelyek bármelyike lehet, a $a(\varepsilon)$ pedig ε szögű elforgatást jelöl az a tengely körül. Ekkor

$$\begin{aligned} J_{-1} &= -\frac{i}{\sqrt{2}} (M_x - iM_y), \\ J_0 &= -iM_z, \\ J_1 &= \frac{i}{\sqrt{2}} (M_x + iM_y) \end{aligned} \quad (62a)$$

(nem önadjungált) vektoroperátorokból álló rendszert képez.

Minthogy P_R hatását a hullámfüggvényre (50) közvetlenül megadja, a fenti operátoroknak a ψ_v^l vektorokra gyakorolt hatása közvetlenül kiszámítható. Először $M_a \psi_v^l$ -t számítjuk ki. Kapjuk:

$$M_a \psi_v^l = \lim \frac{1}{\varepsilon} (P_{a(\varepsilon)} - 1) \psi_v^l = \lim \left(\frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} l & a(\varepsilon) \\ \mu & v \end{bmatrix} - \frac{1}{\varepsilon} \delta_{\mu v} \right) \psi_\mu^l. \quad (63)$$

Szükségünk van az $\begin{bmatrix} l & a(\varepsilon) \\ \mu & v \end{bmatrix}$ mátrixra ε első hatványáig bezárólag. Az $a = Z$ és Y esetekre ezeket (30) és (30a) közvetlenül megadja:

$$\lim \frac{1}{\varepsilon} \left(\begin{bmatrix} l & Z(\varepsilon) \\ \mu & v \end{bmatrix} - \delta_{\mu v} \right) = i v \delta_{\mu v}, \quad (64)$$

és

$$\begin{aligned} \lim \frac{1}{\varepsilon} \left(\begin{bmatrix} l & Y(\varepsilon) \\ \mu & v \end{bmatrix} - \delta_{\mu v} \right) = \\ = \frac{1}{2} \sqrt{(l+v+1)(l-v)} \delta_{\mu v+1} - \frac{1}{2} \sqrt{(l+v)(l-v+1)} \delta_{\mu v-1}. \end{aligned} \quad (64a)$$

Természetesen mindketten antihermitikusak. Ami M_y -t illeti, a (47) analógiájára felírt $Y_\beta = Z^{-1} X_\beta Z$ összefüggés segítségével kapjuk:

$$\begin{aligned} \lim \frac{1}{\varepsilon} \left(\begin{bmatrix} l & X(\varepsilon) \\ \mu & v \end{bmatrix} - \delta_{\mu v} \right) = \\ = \frac{i}{2} \sqrt{(l+v+1)(l-v)} \delta_{\mu v+1} + \frac{i}{2} \sqrt{(l+v)(l-v+1)} \delta_{\mu v-1}. \end{aligned} \quad (64b)$$

Így tehát (63) alapján írható:

$$\begin{aligned} M_x \psi_v^l &= \frac{1}{2} i \sqrt{(l+v+1)(l-v)} \psi_{v+1}^l + \frac{1}{2} i \sqrt{(l+v)(l-v+1)} \psi_{v-1}^l, \\ M_y \psi_v^l &= \frac{1}{2} \sqrt{(l+v+1)(l-v)} \psi_{v+1}^l - \frac{1}{2} \sqrt{(l+v)(l-v+1)} \psi_{v-1}^l, \\ M_z \psi_v^l &= i v \psi_v^l \end{aligned} \quad (65)$$

és

$$\begin{aligned} J_{-1} \psi_v^l &= 2^{-\frac{1}{2}} \sqrt{(l+v)(l-v+1)} \psi_{v-1}^l, \\ J_0 \psi_v^l &= v \psi_v^l, \\ J_1 \psi_v^l &= -2^{-\frac{1}{2}} \sqrt{(l+v+1)(l-v)} \psi_{v+1}^l. \end{aligned} \quad (65a)$$

Ezen képletek egy másik — legalábbis részleges — levezetést e szakasz végén közöljük.

Ha $t=2$, a (61) képletből vezető megfontolás mintájára eljárva azt találjuk, hogy

$$\begin{aligned} q_{-2} &= -\frac{1}{2} (x - iy)^2, & q_2 &= -\frac{1}{2} (x + iy)^2, \\ q_{-1} &= -z(x - iy), & q_1 &= z(x + iy), \\ q_0 &= 6^{-\frac{1}{2}} (x^2 + y^2 - 2z^2) \end{aligned} \quad (66)$$

a másodrendű irreducibilis tenzoroperátorok egy önadjungált rendszerének komponenseit képezik. Alább közöljük a (66) képletek egyszerűbb levezetését.

Számítsuk ki most a $(\psi_v^l, t_\tau \psi_v^{l'})$ kifejezést. Tekintettel P_R unitér voltára és a $\psi^l, \psi^{l'}, t$ rendszerek invarianciájára [lásd (50), (53)] kapjuk:

$$\begin{aligned} (\psi_\kappa^l, t_\tau \psi_\lambda^{l'}) &= (P_R \psi_\kappa^l, P_R t_\tau P_{R^{-1}} P_R \psi_\lambda^{l'}) = \begin{bmatrix} l & R \\ \kappa' & \kappa \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} t & R \\ \tau' & \tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l' & R \\ \lambda' & \lambda \end{bmatrix} (\psi_{\kappa'}^{l'}, t_{\tau'} \psi_{\lambda'}^{l'}) = \\ &= \begin{bmatrix} l & \\ \mu' & \kappa' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l & R \\ \mu' & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l & \\ \mu & \kappa \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} t & R \\ \tau' & \tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l' & R \\ \lambda' & \lambda \end{bmatrix} (\psi_{\kappa'}^{l'}, t_{\tau'} \psi_{\lambda'}^{l'}). \end{aligned}$$

Mind a két oldalon integrálva a csoport minden elemére (5) folytán kapjuk:

$$(\psi_\kappa^l, t_\tau \psi_\lambda^{l'}) = \begin{bmatrix} l & t & l' \\ \mu & \tau & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l & \\ \mu & \kappa \end{bmatrix}^* t_{ll'} = \begin{bmatrix} \kappa & t & l' \\ l & \tau & \lambda \end{bmatrix} t_{ll'}, \quad (67)$$

ahol

$$t_{ll'} = \begin{bmatrix} \kappa' & t & l' \\ l & \tau' & \lambda' \end{bmatrix} (\psi_{\kappa'}^{l'}, t_{\tau'} \psi_{\lambda'}^{l'}) \quad (67a)$$

független a κ, τ, λ indexektől. A (67) egyenlet a kvantummechanikai egyenletek invarianciájának teljes analitikus kifejezését adja meg, amíg csak egy Hilbert-térrel van dolgunk. Speciálisan megmutatja, hogy a (67) mátrixelem eltűnik, hacsak az l és t ábrázolások direkt szorzata nem tartalmazza l' -t, más szóval: hacsak l, t, l' nem képez vektorháromszöget. Ebben az esetben (67) lehetővé teszi, hogy a τ különböző értékeivel jellemzett t_τ komponensek mátrixelemeit összehasonlítsuk egymással, és megadja ezen mátrixelemek viszonyát az ábrázolási térbeli κ, λ indexek különböző értékei mellett. A skalár operátor igen fontos esetében látható, hogy (67) eltűnik, hacsak $l=l'$, és [tekintettel a (7), (32a) képletekre] $\kappa=\lambda$ nem teljesül. Ebben az esetben (67) értéke független κ -tól.

Ha a t_τ rendszer önadjungált, egyszerű számítás mutatja, hogy

$$t_{ll'} = (-1)^{l-l'} t_{l'l}^*. \quad (67b)$$

Összehasonlítva (67)-et (65a)-val láthatjuk, hogy azok a három- j -szimbólumok, amelyekben a középső j egyenlő eggyel, lényegében megegyeznek az infinitezimális operátorok mátrixelemeivel. Ez lehetővé teszi, hogy (65a) levezetését némileg egyszerűsítsük.

14. Az áttérés a kontravariáns komponensekre mint időtükrözés. Láthatjuk, hogy a (67) egyenlet alakja összhangban van a kovariáns-kontravariáns formalizmussal, ha felidézük, hogy a ψ_κ^l vektornak — melynek komplex konjugáltja (67) alatt fellep — a κ kovariáns indexe valójában kontravariáns index. Hasznosnak látszik itt részletesebben kifejteni a kovariáns-kontravariáns formalizmus kapcsolatát az időtükrözés operációjával, mint ahogy azt az előzőekben megtehettük.

Jelölje az időtükrözés operációját θ ; ez antiunitér operátor. Ha a ψ^j hullám-függvények rendszere — azaz a j ábrázolási tér — időtükrözéssel szemben invariáns, a $\theta \psi_v^j = \psi^{jv}$ függvényt (e definíció célszerűsége alább nyilvánvalóvá fog válni) elő kell tudnunk állítani a ψ_v^j függvények lineáris kombinációja alakjában. Minthogy továbbá az alapul vett csoport minden operációja kommutál θ -val, a θ operátor

alkalmazása (50)-re a

$$P_R \psi^{j\nu} = P_R \theta \psi_v^j = \theta \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix} \psi_\mu^j = \begin{bmatrix} j & R \\ \mu & \nu \end{bmatrix}^* \psi^{j\mu} \quad (68)$$

eredményt adja (megjegyezzük, hogy θ antiunitér, azaz $\theta a^\nu \psi_\nu = a^{\nu*} \theta \psi_\nu$). Látható, hogy ψ_v^j a komplex konjugált ábrázolás szerint transzformálódik. A (8) egyenlet segítségével azt kapjuk, hogy

$$\begin{pmatrix} j \\ \nu \nu' \end{pmatrix} \psi^{j\nu'}$$

P_R hatására úgy transzformálódik, mint ψ_v^j . Ha $\begin{pmatrix} j \\ \nu \nu' \end{pmatrix} \psi^{j\nu'}$ nem egyenlő ψ_v^j -vel, úgy csak egy egységnyi abszolútértékű tényezőben különbözhet tőle; ha a ψ_v^j alapvektorokat ezen faktor négyzetgyökével megváltoztatjuk, kapjuk:

$$\psi_v^j = \begin{pmatrix} j \\ \nu \nu' \end{pmatrix} \psi^{j\nu'} = \begin{pmatrix} j \\ \nu \nu' \end{pmatrix} \theta \psi_v^j, \quad (69)$$

vagy

$$\psi^{j\nu} = \theta \psi_v^j = \psi_{v'}^j \begin{pmatrix} j \\ \nu' \nu \end{pmatrix}^*. \quad (69a)$$

Az olyan alaprendszer, amely eleget tesz (69a)-nak, valósnak nevezhető; az előző megfontolás, mely a θ operátor létezésén alapszik, azt mutatja, hogy az alaprendszer mindig választható valósnak. Ez az operátor az egyszerű Schrödinger-elméletben egyszerűen a komplex konjugálás. Ebben az esetben azonban j szükségképpen egész. Ha tekintetbe vesszük a hullámfüggvény spinfüggését, a θ operáció valamivel bonyolultabbá válik, mindamellett lehetővé teszi a $\psi^{j\nu}$ kontravariáns vektorok és a valós alaprendszer definícióját akkor is, ha j fél-egész.

Ha a φ^j (49) alatt invariáns az időtükrözéssel szemben, az $a^{j\nu}$ komponensekkel rendelkező vektort valósnak fogjuk nevezni. Minthogy θ antiunitér operátor, $\theta \varphi$ -re kapjuk:

$$\theta \varphi^j = a^{j\nu*} \theta \psi_v^j = a^{j\nu*} \psi_{v'}^j \begin{pmatrix} j \\ \nu' \nu \end{pmatrix}^*. \quad (70)$$

Ez megegyezik $a^{j\nu} \psi_v^j$ -vel, ha

$$a_v^{j*} = \begin{pmatrix} j \\ \nu \nu' \end{pmatrix}^* a^{j\nu*} = a^{j\nu}, \quad (71)$$

azaz ha a^j kovariáns és kontravariáns komponensei komplex konjugáltak. Könnyen látható, hogy (71) csak akkor elégíthető ki, ha j egész, azaz: a fél-egész ábrázolások terében nincsenek valós vektorok. Ez megfelel annak a jól ismert ténynek, hogy páratlan számú spinor-részecske rendszerének állapotai nem lehetnek invariánsak időtükrözéssel szemben. A fenti megfontolások és a (68)–(71) egyenletek megadják a kvantummechanikai időtükrözés-operáció és a kovariáns-kontravariáns transzformációk kapcsolatának pontosabb értelmét.

Mindaz, amit fent a hullámfüggvények valós voltáról és az időtükrözéssel szemben mutatott invarianciájáról mondtunk, *mutatis mutandis* a t operátorokra is

érvényes. Helyesebb azonban, ha a

$$Q\theta = \theta Q \quad (72)$$

egyenletet kielégítő Q operátort nem „valós”-nak, hanem (az időtükrözéssel szemben) „páros”-nak nevezzük, mivel az operátorokra a „valós” megjelölést az „ön-adjungált” szinonimájaként alkalmazzuk. Az energiaoperátor, ha mágneses tér nincs jelen, természetesen páros.

15. *Két kvantummechanikai rendszer egyesítése. Kilenc-j-szimbólumok.* Két kvantummechanikai rendszer egyesítése útján nyert rendszer állapotai a legcélszerűbben abban a Hilbert-térben írhatók le, amely az egyesítendő rendszerek Hilbert-tereinek a direkt szorzata. E Hilbert-tér tengelyei egy index-párral jellemezhetők; az egyes indexek az egyesítendő Hilbert-terek egyikének, ill. másikának a tengelyeit jellemzik. Ha tehát ψ_λ^l és χ_κ^k ez utóbbi Hilbert-tereknek a tengelyei, úgy a két Hilbert-tér direkt szorzatában a $\psi_\lambda^l \chi_\kappa^k$ szorzatok lesznek a tengelyek. Feltesszük, hogy a két Hilbert-tér a P_R operátorok hatására hasonló módon transzformálódik és hogy a szorzat-tér transzformációját

$$P_R \psi_\lambda^l \chi_\kappa^k = \begin{bmatrix} l & R \\ \lambda' & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k & R \\ \kappa' & \kappa \end{bmatrix} \psi_{\lambda'}^{l'} \chi_{\kappa'}^{k'} \quad (73)$$

adja meg. A fenti problémától teljesen függetlenül érdeklődésünkre tarthat számot a (73)-hoz hasonló szorzatok transzformációs tulajdonságainak problémája. Speciálisan ezen szorzatoknak olyan lineáris kombinációit kívánjuk képezni, amelyek irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak. Kovariáns-kontravariáns formalizmusunk alapján ésszerűnek látszik a

$$\Psi_i^j = [j]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j & \lambda & \kappa \\ 1 & l & k \end{pmatrix} \psi_\lambda^l \chi_\kappa^k = [j]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j \\ i' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & l & k \\ 1' & \lambda & \kappa \end{pmatrix}^* \psi_{\lambda'}^{l'} \chi_{\kappa'}^{k'} \quad (74)$$

kombinációt szemügyre venni. A második sor (10b) és (10c) segítségével kapható. Alkalmazva (73)-at erre az egyenletre, valóban azt kapjuk, hogy

$$P_R \Psi_i^j = \begin{bmatrix} j & R \\ i' & i \end{bmatrix} \Psi_{i'}^j. \quad (74a)$$

A $[j]^{\frac{1}{2}}$ tényezőt azért vezettük be a (74) egyenletben, hogy a Ψ_i^j vektor hossza egy legyen. Megfordítva, a $\psi_\lambda^l \chi_\kappa^k$ szorzat kifejezhető a Ψ -kkel:

$$\psi_\lambda^l \chi_\kappa^k = \sum_j [j]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j & l & k \\ 1 & \lambda & \kappa \end{pmatrix} \Psi_{i'}^j \begin{pmatrix} j \\ i' \end{pmatrix}^*. \quad (74b)$$

A három-j-szimbólum mögött álló kifejezés Ψ^j kontravariáns komponense: $\Psi^{j\prime}$.

A fenti számítások a vektorösszeadási modell leírását adják; ψ^l és χ^k két részecske hullámfüggvényét jelentheti. Ekkor Ψ az ezen két részecskéből álló rendszer hullámfüggvénye. A rendszer lehetséges j értékei $|l-k|$ -tól $l+k$ -ig sorakoznak. Egy másik alkalmazás: $\psi^l = \psi^L$ a helytől függő hullámfüggvény, $\chi^k = \chi^S$ pedig a spin-függvény; $\Psi^j = \Psi^J$ ekkor a teljes hullámfüggvény. A J értékek $|L-S|$ és $L+S$ között sorakoznak.

A fentiekhez nagyon hasonló fogalmak vezethetők be operátorokra vonatkozóan is. Jelölje r_ϱ egy r -edrendű irreducibilis tenzoroperátor komponenseit, melyek a ψ függvények Hilbert-terében hatnak; legyen az s_σ -k jelentése hasonló a χ függvények Hilbert-terében. Más szavakkal

$$r_\varrho \psi_\lambda^l \chi_\kappa^k = (r_\varrho \psi_\lambda^l) \chi_\kappa^k; \quad s_\sigma \psi_\lambda^l \chi_\kappa^k = \psi_\lambda^l (s_\sigma \chi_\kappa^k). \quad (75)$$

Definiáljuk — analógiában (74)-gyel — a

$$t_\tau = [t]^\frac{1}{2} \begin{pmatrix} t \\ \tau \tau' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t & r & s \\ \tau' & \varrho & \sigma \end{pmatrix}^* r_\varrho s_\sigma \quad (76)$$

operátorokat. Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy ezek egy t -edrendű irreducibilis tenzoroperátorok komponenseit képezik. Ennek bizonyításához nem kell feltételeznünk, hogy az r és s komponensek kommutálnak [ami (75)-ből következik]; a t_τ -ok akkor is tenzoroperátor komponensei, ha r és s nem felcserélhető, hacsak sorrendjük ugyanaz (76) minden tagjában. Erre később még visszatérünk.

Az r és s komponensek kommutativitására azonban szükség van ahhoz, hogy megállapíthassuk: ha az r_ϱ, s_σ komponensek önadjungált rendszert képeznek, a t_τ rendszer ugyancsak önadjungált lesz:

$$\begin{aligned} t_\tau^+ &= [t]^\frac{1}{2} \begin{pmatrix} t \\ \tau \tau' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} t & r & s \\ \tau' & \varrho & \sigma \end{pmatrix} s_\sigma^+ r_\varrho^+ = [t]^\frac{1}{2} \begin{pmatrix} t \\ \tau \tau' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} t & r & s \\ \tau' & \varrho' & \sigma' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \varrho \varrho' \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} s \\ \sigma \sigma' \end{pmatrix}^* s_\sigma r_\varrho = \\ &= [t]^\frac{1}{2} \begin{pmatrix} t & r & s \\ \tau & \varrho & \sigma \end{pmatrix}^* s_\sigma r_\varrho = \begin{pmatrix} t \\ \tau' \tau \end{pmatrix}^* t_{\tau'}. \end{aligned} \quad (76a)$$

A második egyenlőség (54) folytán, az utolsó pedig a (11a) egyenletet követően tett megjegyzés, a (76) egyenlet és r, s kommutativitása alapján következik.

Most a (67) egyenlethez hasonló kifejezéseket fogunk kiszámítani. A ψ^j függvények helyett azonban a Ψ^j -ket fogjuk használni, t számára pedig a (76) alakot feltételezzük. A számítások folyamán

$$\begin{aligned} (\psi_\lambda^l \chi_\kappa^k, r_\varrho s_\sigma \psi_{\lambda'}^{l'} \chi_{\kappa'}^{k'}) &= (\psi_\lambda^l, r_\varrho \psi_{\lambda'}^{l'}) (\chi_\kappa^k, s_\sigma \chi_{\kappa'}^{k'}) = \\ &= \begin{pmatrix} l & r & l' \\ \lambda'' & \varrho & \lambda' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & s & k' \\ \kappa'' & \sigma & \kappa' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l \\ \lambda'' \lambda \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} k \\ \kappa'' \kappa \end{pmatrix}^* r_{l'l'} s_{k k'} \end{aligned} \quad (77)$$

alakú kifejezésekkel fogunk találkozni. Az első egyenlőség (75)-ből és a skalár-szorzat két Hilbert-tér szorzatában érvényes definíciójából következik, a második egyenlőség (67) következménye. Felhasználva a (74) és (76) egyenleteket, a

$$(\Psi_i^j, t_\tau \Psi_{i'}^{j'}) = \begin{pmatrix} j & t & j' \\ i'' & \tau & i' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ i'' i \end{pmatrix}^* t_{jj'} \quad (67a)$$

képletben szereplő $t_{jj'}$ komponenseket ki lehet fejezni az $r_{l'l'} s_{k k'}$ szorzatok segítségével:

$$t_{jj'} = ([j][t][j'])^\frac{1}{2} \begin{Bmatrix} j & t & j' \\ l & r & l' \\ k & s & k' \end{Bmatrix} r_{l'l'} s_{k k'}. \quad (78)$$

A (67a) bal oldalára kapott kifejezés, melyet oly módon nyerünk, hogy $\Psi^{j'}$, Ψ^j és t helyére közvetlenül helyettesítjük a (74), ill. (76) kifejezéseket, öt három- j -szimbólumot tartalmaz; ezek közül azonban egyik sem egyezik meg a jobboldalon fellépő három- j -szimbólummal. Abból a célból, hogy a közvetlenül kapott kifejezésnek a jobboldalon látható alakot adjuk, először (18)-at kell alkalmaznunk a három- j -szimbólumok közül kettőre (mindegy, hogy melyik kettőre); ennek eredményeképpen az oszlopok közül egyesek felcserélődnek. Ezután két ízben alkalmazhatjuk (22)-t; ily módon nyerjük a (67a) alakot. A (78) egyenletben fellépő kilenc- j -szimbólumra ily módon kapjuk:

$$\begin{Bmatrix} j & t & j' \\ l & r & l' \\ k & s & k' \end{Bmatrix} = \sum_m (-1)^{2m} [m] \begin{Bmatrix} j & l & k \\ s & k' & m \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} t & r & s \\ l & m & l' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j' & l' & k' \\ m & j & t \end{Bmatrix}. \quad (78a)$$

A (78a) kifejezésre természetesen számos ortogonalitási és szimmetria-reláció érvényes, melyek vagy (78a)-ból kaphatók meg a 3. szakasz összefüggéseinek felhasználásával, vagy még egyszerűbben a kilenc- j -szimbólumok következő alternatív kifejezéséből:

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ \lambda_{11} & \lambda_{21} & \lambda_{31} \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ \lambda_{12} & \lambda_{22} & \lambda_{32} \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ \lambda_{13} & \lambda_{23} & \lambda_{33} \end{pmatrix}^*. \quad (78b)$$

A (78b) egyenlet legközvetlenebb leszármaztatása a (78)-at követően említett egyenletből történhet, mely a $(\Psi_i^j, t_\tau \Psi_{i'}^{j'})$ kifejezést közvetlenül (74) és (76) felhasználásával állítja elő és amely öt hat- j -szimbólumot tartalmaz. Ebből az egyenletből kapjuk:

$$\begin{pmatrix} j \\ i''_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & t & j' \\ i'' & \tau & i' \end{pmatrix}^* (\Psi_i^j, t_\tau \Psi_{i'}^{j'}) = t_{ji'}.$$

Ezt (78)-cal összehasonlítva közvetlenül kapjuk (78b)-t. Ez az egyenlet azt mutatja, hogy — bizonyos értelemben — a kilenc- j -szimbólumok a legszimmetrikusabb invariáns kifejezések az ábrázolási terek szorzatterében. Az a tény, hogy a (78b) invariáns kifejezés felírható a hat- j -szimbólumok segítségével, ugyancsak következik Biedenharn egy tételéből. A kilenc- j -szimbólumok ortogonalitási és szimmetria-relációt nem tárgyaljuk részletesen.

Van néhány olyan speciális eset, amikor (78) sokkal egyszerűbb alakot ölt. A legegyszerűbb ezek közül a skaláris (a csoport transzformációval szemben invariáns) t operátor esete. Ez természetesen csak akkor lehetséges, ha r és s azonos rendűek; a skalárt ebben az esetben (76), (7) és (13) folytán a következő kifejezés adja meg:

$$S = (-)^{2r} [r]^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} r \\ \rho\sigma \end{pmatrix}^* r_\rho s_\sigma. \quad (79)$$

Ha a (78a) egyenletbe a $t=0$ értéket helyettesítjük, az utóbbi hat- j -szimbólum eltűnik, hacsak $j=j'$ (ez természetes, mivel t skalár) és $m=l'$ nem teljesül. Így tehát (78a)

alatt csak egy tag marad meg és a két utolsó hat- j -szimbólumot (18b) közvetlenül megadja. A (7) egyenlet segítségével kapjuk:

$$(\Psi_i^j, S\Psi_i^j) = \delta_{ii'} [r]^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j+k'+l+r} \left\{ \begin{matrix} j & k & l \\ r & l' & k' \end{matrix} \right\} r_{ll'} s_{kk'}. \quad (79a)$$

A vessző az első Ψ mellett azt jelzi, hogy bár ezt a Ψ' -t j -nek ugyanaz az értéke jellemzi, mint a második Ψ -t, nem szükségképpen azonos azzal; Ψ' a $\psi^l \chi^k$ szorzatok lineárkombinációja, Ψ pedig a $\psi^{l'} \chi^{k'}$ szorzatoké.

Egy másik eset, amelyben a kilenc- j -szimbólum hat- j -szimbólumra redukálódik, olyankor áll elő, amikor az s (vagy az r) operátor skalár. Ebben az esetben

$$t_\tau = r_\tau s. \quad (80)$$

Ha $s=0$, az első két hat- j -szimbólum eltűnik, hacsak $k=k'$, $t=r$ (ez természetes), valamint $m=l$ nem teljesül. Így tehát az összeg (78a) alatt ismét egyetlen tagra korlátozódik és az első két hat- j -szimbólumot ismét megadja a (18b) képlet. A kilenc- j -szimbólumra kapjuk:

$$\left\{ \begin{matrix} j & t & j' \\ l & t & l' \\ k & 0 & k \end{matrix} \right\} = \frac{(-1)^{j'+t+l'+k}}{([k][t])^{\frac{1}{2}}} \left\{ \begin{matrix} j & t & j' \\ l' & k & l \end{matrix} \right\}; \quad (80a)$$

kapjuk továbbá

$$t_{jj'} = (-1)^{j'+t+l+k} \left(\frac{[j'] [j]}{[k]} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} j & t & j' \\ l' & k & l \end{matrix} \right\} r_{ll'} s. \quad (80b)$$

Ha $s=1$, ez a képlet megadja $t_{jj'}/r_{ll'}$ viszony értékét; a számlálóban az $r_\tau = t_\tau$ operátornak az összetett rendszer Ψ állapotait összekötő mátrixeleme áll, a nevező pedig ugyanazon $r_\tau = t_\tau$ operátornak a mátrixeleme, amely azonban a komponensek egyikének ψ állapotait köti össze. Egy jól ismert probléma, amelyre (80b) alkalmazható, a mágneses pályamomentum (vagy spinmomentum) hozzájárulása az atom mágneses momentumához. Ebben az esetben a két rendszer, amelyet egyetlen összetett rendszerré egyesítünk: a részecskék pályamenti mozgása és a spinek. Az elsőt a koordinátáktól függő ψ függvény írja le, melynek l indexét szokás szerint L -lel jelölik, az utóbbit pedig a χ spinfüggvény; k helyett szokás szerint S -et írunk. A pályamomentum operátora a (62a)-beli J vektoroperátor; ennek a ψ állapotokra vonatkoztatott mátrixelemei közvetlenül megkaphatók (65a)-ból. A feladat ezen operátor mátrixelemeinek meghatározása az összetett rendszer Ψ hullámfüggvényeire (az atom teljes hullámfüggvényeire) vonatkozóan. Ezeket (67a) adja meg, ahol $t_{jj'}$ értékét a (80b) egyenletből kell vennünk. Ha $t=1$, $j=j'=J$, $k=S$ és $l=l'=L$, a (80b) egyenletben álló hat- j -szimbólum lényegében a Landé-féle g -faktor.

16. Irreducibilis tenzorok kombinációi. Korábban említettük, hogy az irreducibilis tenzoroperátorokra vonatkozó, (76) alatt megadott kombinációs törvény sokkal szélesebb körben alkalmazható, mint ahogy azt az előző szakaszban megadott példa alapján gondolhatnánk. A (76) alatt megadott kifejezés nem csak akkor lesz t -edrendű tenzoroperátor, ha r és s különböző Hilbert-terekben hatnak. Tenzoroperátor lesz akkor is, ha r és s tetszőleges irreducibilis tenzoroperátorok ugyanabban a Hilbert-terben; még kommutálniuk sem kell. Ez az egyenlet tehát különlegesen alkalmas

arra, hogy segítségével alacsonyabb rendű tenzoroperátorokból magasabb rendű tenzoroperátorokat képezzünk. Így pl. a (66) alatt megadott tenzoroperátor a fent közölt levezetésnél egyszerűbb úton is megkapható, ha a (76) képletben mind r , mind pedig s helyére a (61) alatt megadott v operátort helyettesítjük. A t számnak a $t=2$ értéket kell adnunk, megfelelően annak, hogy (66) másodrendű tenzor; azonkívül $r=s=1$ írandó, tekintettel a (61) alatt megadott v operátor vektor jellegére. Hasonló tenzoroperátor szerkeszthető a (62a) alatt megadott J_τ operátorokból.

A J_τ operátorokból ily módon kapott másodrendű tenzoroperátor, és a (76) képletnek a J_τ operátorokra való ismételt alkalmazásával kapott magasabb rendű tenzoroperátorok lehetővé teszik, hogy több meglehetősen gyakori kérdést természetesebb és szimmetrikusabb módon fogalmazzunk meg. Így pl. a kvadrupólmomentumot szokás szerint mint a $-\sqrt{6}q_0$ operátornak a ψ_j^j hullámfüggvénnyel (azaz a ψ_v^j hullámfüggvénnyel, $v=j$ mellett) képezett várható értékét definiáljuk. Ez — a definíció szerint — valamennyi ψ_v^j állapot kvadrupólmomentuma. Ehelyett szemügyre vehetjük a

$$Q = 5^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 2 \\ \tau Q \end{pmatrix}^* q_\tau J_\tau^2 \quad (81)$$

skalár operátort [vö. (79)], ahol J^2 a fent említett tenzoroperátor:

$$J_\tau^2 = 5^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 2 \\ \tau \tau' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ \tau' & Q' & \sigma' \end{pmatrix}^* J_{Q'} J_{\sigma'}. \quad (81a)$$

Így tehát

$$Q = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ Q & Q' & \sigma' \end{pmatrix}^* q_Q J_{Q'} J_{\sigma'}.$$

Ennek az operátornak a várható értéke ugyanaz a ψ_v^j állapotok mindegyikében; nagysága — adott j mellett — arányos a szokott módon definiált kvadrupólmomentummal.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1970. XI. 2. — Terjedelem: 9,1 (A/5) ív
70-6328 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

oldal

- Menyhárd Nóra*: Erős csatolású és anizotróp szupravezetők mikroszkopikus elmélete a kritikus hőmérséklet közelében, mágneses tér jelenlétében 105

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

- Wigner Jenő*: Bizonyos véges csoportok ábrázolásairól 159
Wigner Jenő: A mátrixokról, amelyek egyszerűen reducibilis csoportok ábrázolásainak Kronecker-szorzatát kiredukálják 165

KÖNYVISMERTETÉS

- B. M. Gugelj*: Luminofori dlja elektrovakummnoj promislenosti. Energia kiadó. 1967, (Szigeti György és Sviszt Pál) 158

307.226

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

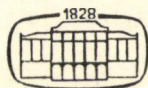
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

2

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adnak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

REZONANCIA-JELENSÉGEK A MAGREAKCIÓKBAN*

LOVAS ISTVÁN

MTA, Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Tartalomjegyzék

I. Bevezetés	209
II. Kétrészecske-rendszer	213
II. 1. Schrödinger egyenlet	213
II. 2. Lippmann—Schwinger egyenlet	215
II. 3. Green függvény	217
II. 4. Szórási amplitúdó	219
III. Háromrészecske-rendszer	220
III. 1. Lippmann—Schwinger egyenlet	220
III. 2. A Weinberg-féle eljárás	221
III. 3. A Faddeev-féle eljárás	225
IV. Sokrészecske-rendszer	229
IV. 1. A módszerek csoportosítása	229
Az „exakt” magreakció elméletek	230
A „formális” magreakció elméletek	230
A „dinamikus” magreakció elméletek	231
IV. 2. A Feshbach-féle általános magreakció elmélet	231
V. Rezonanciák a rugalmas neutron szórásban	234
VI. Izobár analóg rezonanciák	241
VII. A rezonancia reakciók exaktul megoldható modellje	253
VII. 1. A magreakció modellek korlátai	253
VII. 2. A modell	254
VII. 3. A modell alkalmazásai	261
VIII. Összefoglalás	264
IX. Irodalom	265

I. Bevezetés

A rezonancia az egyik legáltalánosabb fogalom és az anyagi világnak az egyik legváltozatosabb formákban előforduló jelensége, már-már filozófiai kategória. Rezonancia-jelenségekkel találkozunk a lét minden szintjén, kezdve a fizikától, a biológián át, egészen a lélektanig. Éppen ezért meglehetősen nehéz a rezonancia fogalmát teljes általánosságban definiálni. A klasszikus mechanikában érvényes definíció szerint rezonancia-jelenség akkor jön létre, ha egy önrezgésre képes rendszert olyan frekvenciájú külső erővel gerjesztünk, amely közelítőleg megegyezik a rendszer valamelyik sajátfrekvenciájával. Ez a definíció elfogadható teljesen általános érvényűnek is, ha a „rezgőképes rendszer” fogalmát eléggé általánosítjuk ahhoz, hogy magába foglalhassa ne csak a mechanikai, de az elektrodinamikai, kvantum-mechanikai, biológiai, sőt esetleg a tudattal rendelkező biológiai rendszereket is. Ebben a dolgozatban a rezonancia-jelenségeknek egy speciális osztályával, nevezete-

* Doktori disszertáció: Érkezett 1970. dec. 10.

sen a magreakciókban, pontosabban az egynukleon bombázás révén létrejövő magreakciókban észlelhető rezonancia-jelenségekkel foglalkozunk.

Már a harmincas évek elején megfigyelték, hogy neutronokkal atommagokat bombázva a reakció mért hatáskeresztmetszete függ a bombázó neutron energiájától és bizonyos jól meghatározott energiaértékek közelében ugrásszerűen változik [1]. Csakhamar kitűnt, hogy nagyfokú hasonlóság található ezen jelenség és a csillapított mechanikai, illetve elektromágneses kényszerrezgések között. A mechanikai kényszerrezgések esetén a rezgések A amplitúdója függ a külső gerjesztés ω frekvenciájától és az ω_r sajátfrekvenciáktól. Az $A(\omega)$ függvény az ω_r sajátfrekvenciák közelében ugrásszerű változást, nevén nevezve rezonanciajellegű változást mutat. A neutronbombázás hatására létrejövő magreakciók $\sigma(E)$ hatáskeresztmetszete bizonyos $E = E_r$ energiaértékek közelében ugyanolyan módon változik, mint az $A(\omega)$ függvény az ω_r sajátfrekvenciák környékén. Csillapított mechanikai kényszerrezgések esetén egy-egy rezonancia jellemzésére az ω_r saját-, (vagy „rezonancia”-) frekvencián kívül meg kell adni a γ_r rezonancia szélességet is, amely a csillapítás mértékét jellemzi. Ugyanígy a magfizikai rezonanciák esetén is az egyes rezonanciákhoz többé-kevésbé egyértelműen hozzárendelhető az E_r rezonancia energia és a Γ_r rezonancia szélesség [2]. A mechanikai és a magfizikai rezonancia közötti analógiát felhasználva könnyen megfogalmazhatjuk a magfizikai rezonanciák tanulmányozásának célját és jelentőségét: Mechanikai rendszerek esetén elvben lehetőség van arra, hogy a rendszer strukturális elemeinek, ezen elemek geometriai méretének és térbeli elhelyezkedésének, valamint rugalmasságtani jellemzőinek ismeretében meghatározzuk a rendszer ω_r rezonancia frekvenciáit és γ_r rezonancia szélességeit. A magfizikában ezen eljárás *fordítottját* igyekszünk alkalmazni, nevezetesen a megfigyelt E_r rezonanciaenergiákból, illetve a Γ_r rezonancia szélességekből próbálunk visszakövetkeztetni a magfizikai rendszer strukturális viszonyaira.

A magfizika fejlődése során a rezonancia-jelenségek értelmezésére két különböző megközelítési mód, a formális és a dinamikai leírásmod alakult ki. Ennek a két irányzatnak a lényegét röviden a következőképpen lehet megfogalmazni.

A *formális* leírásmod [3–5] keretében a soknukleon-rendszer Schrödinger egyenletéből és a nukleáris kölcsönhatások rövidhatótávolságú jellegéből kiindulva, korrekt matematikai eszközökkel bizonyítani lehet, hogy a soknukleon-rendszerben valóban kell rezonanciáknak létezniük. A formális megközelítési mód lehetőséget ad arra, hogy az S mátrixot, illetve a hatáskeresztmetszeteket olyan függvényekkel írjuk le, amelyek egyrészt helyesen tükrözik az energiától való függést, másrészt a függvényekben szereplő paraméterek közvetlen kapcsolatba hozhatók a rezonanciákra jellemző megfigyelhető mennyiségekkel. A formális leírásmod matematikai szempontból exakt, fizikai szempontból azonban nem tekinthető a probléma kielégítő megoldásának, mert a formulákban előforduló paraméterek, valamint a nukleáris rendszer strukturális és dinamikai tulajdonságai közötti kapcsolat annyira közvetett és bonyolult, hogy a rezonanciaparaméterek mért értékeiből nem tudunk következtetni a mag struktúrájára, illetve dinamikájára.

A *dinamikai* leírásmod keretében engedményeket teszünk az általánosság és a matematikai exaktság rovására és inkább a fizikai követelményeknek igyekszünk megfelelni azáltal, hogy az S mátrixot, vagy közvetlenül egy dinamikai modellből (pl. a héjmodellből) kiindulva származtatjuk le [6–7], vagy legalábbis lehetőséget keresünk arra, hogy a leírásba a konkrét rendszer dinamikai tulajdonságaira vonatkozó konkrét ismeretek közvetlenül beépíthetők legyenek [8–10].

A különböző formális elméletekben a rezonanciák pontos fogalma elméletről-elméletre változik, de közös bennük az a vonás, hogy a rezonanciák mind „egyenrangúak”. A legtöbb elméletben e rezonanciák az S -mátrixnak a fizikai tartomány közelébe eső, komplex energiákhoz tartozó pólusaival hozhatók kapcsolatba. Ezzel szemben a dinamikai leírásmódban „minőségileg” különböző rezonanciák léteznek, amelyek hierarchikus rangjuknak megfelelően különböző (egyrészesekés, doorway, hallway, compound) osztályokba sorolhatók [11–13]. A továbbiakban a formális leírásmóddal egyáltalában nem fogunk foglalkozni, ezért a bevezetés hátralevő részét a dinamikai leírásmód alapfogalmainak vázlatos összefoglalására szánjuk.

A héjmodell alapfeltevése szerint a mag nukleonjai együttesen kialakítanak egy átlagos potenciálteret, amely véges hatótávolságú és vonzó jellegű. Első közelítésben az egyes nukleonok ebben az átlagos potenciáltérben egymástól függetlenül mozognak. Második lépésként figyelembe kell venni a maradékkölcsönhatást, azaz a valódi nukleon-nukleon kölcsönhatásoknak az átlagpotenciálba be nem olvasztható részét. Az átlagpotenciálban mozgó nukleon energiája csak jól meghatározott diszkrét értékeket vehet fel mindaddig, amíg a nukleon energiája negatív. Ezen negatív energiasajátértékekhez normálható sajátfüggvények tartoznak, amelyek kötött állapotokat írnak le. A pozitív energiájú állapotok az energia tekintetében folytonos sokaságot alkotnak, a hullámfüggvények nem normálhatók, a végtelenben is különböznek zérustól, következésképp szórási állapotokat írnak le.

Bizonyos pozitív E_r energiaértékek közelében az átlagos potenciáltérben mozgó részecske hullámfüggvényének amplitúdója különösen nagy a vonzó jellegű potenciál hatótávolságán belül. Ebben a térrészben a hullámfüggvény nagyon emlékeztet egy kötött állapot hullámfüggvényére, lényeges különbség csak a potenciál hatótávolságán kívül van, ahol egy kötött állapot hullámfüggvénye exponenciálisan csökken, ezzel szemben a szórási állapot hullámfüggvénye véges amplitúdóval oszcillál. Az ilyen E_r energiaértékek környezetében a $\sigma(E)$ hatáskeresztmetszet rezonanciát mutat. A jelenség lényegének kidomborítása érdekében egy pillanatra tételezzük fel, hogy az átlagpotenciál egy derékszögű völgy és a részecske pályamomentuma zérus $l=0$. Ebben az esetben a hullámfüggvény amplitúdója olyan $E=E_r$ energiáknál vesz fel maximális értéket a potenciál hatótávolságán belül, amely energiaértékeknek a belső tartományban megfelelő hullámhossz negyedének páratlan számú többszöröse éppen megegyezik a potenciál hatótávolságával. Innen világosan látható, hogy ez a fajta rezonancia mind fizikai, mind matematikai értelemben megfelel az üregrezonátorok és hullámvezetők esetében előforduló rezonanciának, ahol a rezonancia feltétele mindig kifejezhető a hullámhossz és a rendszer geometriai méreteinek viszonyával. A magfizikában az ilyen jellegű rezonanciát, egy-részecskés, vagy potenciál rezonanciának nevezik, minthogy egyetlen részecskének valamely potenciáltérben való mozgásával kapcsolatos jelenségről van szó. A magfizikai rezonanciák hierarchikus rendjében a potenciál rezonancia a legalacsonyabb „rangú”, mert fogalmilag és fizikailag is ez a legegyszerűbb. A többi rezonanciát röviden sok-részecskés rezonanciáknak nevezhetjük, utalva ezzel arra, hogy kialakulásukhoz az átlagos potenciáltérén kívül egynél több részecskére van szükség. A héjmodell második alapfeltevése szerint a vonzó jellegű, rövidhatótávolságú átlagpotenciáltérben létrejövő kötött egyrészecske állapotokat a mag nukleonjai a Pauli-elvnek megfelelően töltik be. Alapállapotban a Fermi-szint alatt minden állapot be van töltve, a Fermi-szint fölött minden állapot üres. A maradékkölcsönhatás figyelembevétele ezt az

egyszerű képet kissé módosítja: a Fermi-szint közelében a nukleoneloszlás nem ugrás-szerűen, hanem folytonosan változik. Most képzeljünk el kissé egyszerűsített formában egy magreakciót. Az alapállapotban levő targetmag felé közeledik egy (természetesen pozitív energiájú állapotban levő) nukleon. Első közelítésben a bombázó nukleon csak a targetmag nukleonjai által együttesen kialakított átlagos potenciálteret érzi. Második közelítésben azonban az individuális nukleon-nukleon ütközéseket is figyelembe kell venni. Ezek eredményeképpen bekövetkezhet, hogy a targetmagnak eddig a Fermi-szint alatt tartózkodó egy, vagy több nukleonja energiát nyervén, felugrik a Fermi-szint feletti kötött egy-részecske állapotok valamelyikébe, a bombázó nukleon pedig az ütközés során energiát veszítvén, leeshet valamelyik negatív energiájú kötött állapotba. Ily módon kialakulhat olyan konfiguráció, amelyben minden részecske kötött egy-részecske állapotban van. Az ilyen (független részecske) rendszer energiája teljesen jól definiált, a rendszer hullámfüggvénye pedig, az átlagpotenciál hatótávolságán belüli térrészben rendelkezik nagy amplitúdóval. Ezen kvázikötött, vagy „kontinuumba ágyazott” kötött állapotból a rendszer, individuális nukleon-nukleon ütközések révén képes visszaalakulni az eredeti „targetmag + egy nukleon” konfigurációnak megfelelő állapotba. Ezen kvázikötött állapot kialakulása és elbomlása idézi elő a szórási hatáskeresztmetszetben a rezonanciát. A rezonancia természetesen a kvázikötött állapot energiájának a közelében fog jelentkezni. A rezonancia szélességét a kvázikötött állapot átlagos élettartama határozza meg, nevezetesen a rezonancia szélesség fordítva arányos az átlagos élettartammal.

A kvázikötött állapot természetrajzát tekintve, nagyon sokféle lehet. Egyetlen individuális ütközéssel „két-részecske-egy-lyuk” konfiguráció áll elő. Az ilyen állapotok koherens szuszperpozíója a rendszer egy, többé-kevésbé jól meghatározott gerjesztésének felel meg. Az ilyen egyszerű szerkezetű kvázikötött állapotokat az irodalomban doorway, vagy hídfő-állapotoknak nevezik.

A valamivel bonyolultabb, például „három-részecske-két-lyuk” konfigurációval jellemzett kvázikötött állapotokat „hallway” állapotoknak szokás nevezni. Ismételt ütközések révén a bombázó részecske energiájának rovására, kialakulhat olyan rendkívül bonyolult szerkezetű állapot, amely sok különféle „sok-részecske-sok-lyuk” konfiguráció keverékének felel meg. A neutronokkal kiváltott magreakciók hatás-keresztmetszetében észlelhető igen keskeny rezonanciák értelmezésére *Niels Bohr* még 1936-ban bevezette az ilyen kontinuumba ágyazott, maximális bonyolultságú állapotnak a fogalmát [14], amelyet Bohr nyomán compound állapotnak nevezünk.

Minél nagyobb a kvázikötött állapot bonyolultsági foka, annál kisebb az elbomlás valószínűsége, azaz annak a valószínűsége, hogy ismételt ütközések révén a megszökéshez elegendő energia koncentrálódjon egyetlen nukleonra. Másszóval, a kvázikötött állapot élettartama, az állapot bonyolultsági fokával együtt növekszik. Ezért bonyolult, kvázikötött állapothoz keskeny, az egyszerű állapothoz széles rezonancia tartozik.

Az elmondottakból látszik, hogy az összes rezonancia-állapot, beleértve a potenciál rezonanciát is, bizonyos értelemben hasonlít a kötött állapothoz, nevezetesen a hullámfüggvénynek az átlagpotenciál hatótávolságán belül nagy az amplitúdója, másszóval ebben a térrészben a részecskék megtalálási valószínűsége relatíve nagy. A kötött állapotok és a rezonancia-állapotok közötti hasonlóság formálisan úgy jut kifejezésre, hogy a kötött állapotokhoz is, és a rezonanciákhoz is, az S -mátrixnak egy-egy pólus jellegű szingularitását lehet hozzárendelni. Amíg a kötött állapotok-

hoz tartozó pólusok negatív valós energiaértékeknél fordulnak elő, addig a rezonanciákhoz tartozó pólusok komplex, pontosabban pozitív valós résszel és negatív imaginárius résszel rendelkező komplex energiaértékeknél fordulnak elő.

Ahhoz, hogy a magfizikai rezonancia-jelenségeket módszeresen tanulmányozhassuk, egy jól megalapozott, matematikailag kezelhető, dinamikai jellegű magreakció elméletre van szükség. A dolgozat első felében azzal fogunk foglalkozni, hogy egy ilyen elmélet kiépítésének milyen lehetőségei és milyen korlátai vannak. A dolgozat második felében egy konkrét magreakció elmélet alkalmazását mutatjuk be konkrét rezonancia-jelenségek tanulmányozására. Befejezésül pedig a magfizikai rezonancia-jelenségeknek egy exaktul megoldható modelljét szerkesztjük meg.

II. Kétrészecske-rendszer

II. 1. Schrödinger egyenlet

Két részecskéből álló rendszer Schrödinger egyenlete a

$$[T_1 + T_2 + V_{12}]|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 1})$$

alakba írható, ahol T_1 és T_2 a két részecske kinetikus energiájának, V_{12} pedig a köztük működő kölcsönhatásnak az operátorát jelöli.

Koordináta-reprezentációban, tömegközépponthoz rögzített koordináta rendszert választva kapjuk, hogy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \psi_E(\vec{r}) + \int \langle \vec{r} | V_{12} | \vec{r}' \rangle \psi_E(\vec{r}') d\vec{r}' = E \psi_E(\vec{r}) \quad (\text{II. 2})$$

Itt kihasználtuk azt az általános követelményt, hogy az egyenletnek invariánsnak kell maradnia a koordináta rendszer eltolásával szemben, ami az

$$\langle \vec{R} | V_{12} | \vec{R}' \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \langle \vec{r} | V_{12} | \vec{r}' \rangle \quad (\text{II. 3})$$

összefüggés fennállása esetén biztosítható.

A (II. 2) és (II. 3) képletekben E a relatív mozgás energiája, m a redukált tömeg, $\vec{R} = (m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a tömegközépponti, $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ pedig a relatív koordinátákat jelöli. A (II. 2) integro-differenciálegyenlet differenciálegyenletre redukálódik, ha a kölcsönhatás lokális:

$$\langle \vec{r} | V_{12} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') V_{12}(\vec{r}) \quad (\text{II. 4})$$

A (II. 2) egyenletnek első deriváltjával együtt folytonos, mindenütt véges, egyértelmű megoldásai, szórásfolyamatot írnak le, ha teljesül a

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \psi_E(\vec{r}) = e^{ikz} + f(\vartheta, \varphi, k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II. 5})$$

aszimptotikus határfeltétel, ahol $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$. (Az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy a kölcsönhatás rövid hatótávolságú.)

Az $f(\vartheta, \varphi, k)$ szórási amplitúdó segítségével a mérhető differenciális hatáskeresztmetszet, amint az közismert [15], egyszerűen kiszámítható:

$$\frac{d\sigma(\vartheta, \varphi, k)}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi, k)|^2 \quad (\text{II. 6})$$

A $\psi_E(\vec{r})$ megoldás, illetve a szórási amplitúdó meghatározására a leggyakrabban alkalmazott eljárás a parciális hullámok módszere. A $\psi_E(\vec{r})$ hullámfüggvényt és a kölcsönhatás potenciálját gömbfüggvények szerint sorbafejtjük:

$$\psi_E(\vec{r}) = \sum_{lm} \frac{u_{Elm}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II. 7})$$

$$\langle \vec{r} | V_{12} | \vec{r}' \rangle = \sum_{\substack{l'l' \\ mm'}} Y_{lm}^*(\vartheta\varphi) \frac{V_{l'm'}^{lm}(r, r')}{rr'} Y_{l'm'}(\vartheta'\varphi') \quad (\text{II. 8})$$

Ekkor az $u_{Elm}(r)$ radiális hullámfüggvények a

$$\frac{d^2 u_{Elm}(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{Elm}(r) - \sum_{l'm'} \int V_{l'm'}^{lm}(r, r') u_{El'm'}(r') dr' = 0 \quad (\text{II. 9})$$

egyenletrendszernek tesznek eleget.

Speciális esetben, amikor a V_{12} kölcsönhatás a lokalitáson kívül spinfüggetlen és forgásszimmetrikus is, az egyenletrendszer szétesik, független közönséges differenciálegyenletekre:

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - V_z(r) \right) u_{El}(r) = 0 \quad (\text{II. 10})$$

A hullámfüggvény végességére vonatkozó követelmény akkor teljesül, ha a (II. 10) egyenlet megoldásaira az $u_{El}(r=0)=0$ határfeltételt írjuk elő. A megoldás aszimptotikus alakja:

$$u_{El}(r) \sim \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (\text{II. 11})$$

$r \rightarrow \infty$

ahol δ_l a szórási fázist jelöli, amelynek értékét a (II. 10) egyenlet integrálásával lehet meghatározni és amelynek segítségével azután az $f(\vartheta, \varphi, k)$ szórási amplitúdó könnyen kifejezhető.

Ha a részecskék spinje nem zérus, akkor az $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ gömbfüggvények helyett célszerűbb az

$$\mathcal{Y}_{lsjm}(\vartheta\varphi\xi_1\xi_2) = \sum_{m\sigma} (lms\sigma | j\mu) Y_{lm}(\vartheta\varphi) \chi_{s\sigma}(\xi_1\xi_2) i^l \quad (\text{II. 12})$$

teljes impulzusmomentum sajátfüggvények szerinti sorfejtését használni, ahol

$\chi_{s\sigma}(\xi_1, \xi_2)$ a két részecske teljes spinfüggvénye és $(lms\sigma|j\mu)$ a Clebsch—Gordan együtthatót jelöli. Ekkor

$$\psi_E(\vec{r}) = \sum_{lsj\mu} \frac{u_{Ejs}^{ls}(r)}{r} \mathcal{Y}_{lsj\mu}(\vartheta\varphi\xi_1\xi_2) \quad (\text{II. 7a})$$

$$\langle \vec{r} | V_{12} | \vec{r}' \rangle = \sum_{\substack{l's'j'\mu' \\ l's'j'\mu'}} \mathcal{Y}_{lsj\mu}^+(\vartheta\varphi\xi_1\xi_2) \frac{V_{lsj\mu}^{l's'j'\mu'}(rr')}{rr'} \mathcal{Y}_{l's'j'\mu'}(\vartheta'\varphi'\xi_1'\xi_2') \quad (\text{II. 8a})$$

és a (II. 9) egyenlet a

$$\frac{d^2 u_{Ejs}^{ls}(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{Ejs}^{ls}(r) - \sum_{l's'j'\mu'} \int V_{lsj\mu}^{l's'j'\mu'}(rr') u_{Ejs'}^{l's'j'\mu'}(r') dr' \quad (\text{II. 9a})$$

alakot ölti.

Ha a kölcsönhatás forgásinvariáns, akkor

$$V_{l's'j'\mu'}^{lsj\mu}(rr') = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} V_{l's'j}^{lsj}(rr') \quad (\text{II. 13})$$

Ha feltételezzük, hogy a kölcsönhatás sem tenzorérő, sem spin-pálya kölcsönhatást nem tartalmaz, akkor további egyszerűsödés áll elő:

$$V_{l's'j}^{lsj}(rr') = \delta_{ll'} \delta_{ss'} V_{lj}(rr') \quad (\text{II. 14})$$

Kettőnél több részecskét tartalmazó rendszerben lezajló ütközések leírására ez, a Schrödinger-egyenlet közvetlen megoldásán alapuló módszer nehezen általánosítható, minthogy a határfeltételek megfogalmazása igen nehéz, legalábbis eddig az ilyen irányú próbálkozások sikertelenül végződtek. Ezért célszerű olyan leírás-módot keresni, amely kettőnél több részecskéből álló rendszer esetére is általánosítható.

II. 2. Lippmann—Schwinger egyenlet

A Schrödinger egyenletet, amely alakját tekintve differenciálegyenlet, (illetve, ha a kölcsönhatás nem lokális, akkor integro-differenciál egyenlet) megfelelő határfeltételekkel kell kiegészíteni ahhoz, hogy a fizikai probléma egyértelmű matematikai megfogalmazást nyerjen. Lippmannnak és Schwingernek a nevéhez fűződik az az eljárás, amelynek során a Schrödinger egyenletet és a hozzá tartozó határfeltételeket egyetlen egyenletbe, az ún. Lippmann—Schwinger-féle integrálegyenletbe foglaljuk össze.

Két részecske rendszer esetén a Lippmann—Schwinger egyenlet használata semmilyen különleges előnnyel nem jár az eredeti Schrödinger egyenleten alapuló eljáráshoz képest. Ezzel szemben a kettőnél több részecskéből álló rendszerek tanulmányozásához, amint már megjegyeztük, és amint ezt a továbbiakban majd látni fogjuk, a Lippmann—Schwinger egyenlet igen célszerű kiindulási pontként szolgál.

Vegyük szemügyre a Schrödinger egyenletet:

$$(E - H_0) |\Psi_E\rangle = V |\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 15})$$

ahol $H = H_0 + V$ a rendszer teljes Hamilton operátora. Felhasználva az

$$(E - H_0) |\Phi_E\rangle = 0 \quad (\text{II. 16})$$

egyenlet $|\Phi_E\rangle$ megoldását a (II. 15) egyenlet formális megoldását a következő alakba lehet írni:

$$|\Psi_E\rangle = |\Phi_E\rangle + i \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 17})$$

Ez a Lippmann–Schwinger egyenlet [16], amely jellegét tekintve integrál-egyenlet és amelyet a legtöbbször úgy szoktak felírni, hogy a limes képzést automatikusan beleértik az $i\varepsilon$ -t tartalmazó kifejezés definíciójába:

$$|\Psi_E\rangle = |\Phi_E\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 18})$$

Könnyű belátni, hogy kétrészecske rendszer esetén a (II. 18) egyenlet megoldása kielégíti mind a Schrödinger egyenletet, mind pedig a (II. 5) határfeltételt, ha a $H_0 = T_1 + T_2$ operátornak azt a $|\Phi_E\rangle$ sajátfüggvényét választjuk, amely koordináta reprezentációban z irányban haladó síkhullámot ír le.

Írjuk fel ugyanis a (II. 17) egyenletet a tömegközépponthez rögzített koordináta-rendszert használva, koordináta reprezentációban:

$$\psi_E(\vec{r}) = \Phi_E(\vec{r}) + \int G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}') \langle \vec{r}' | V | \vec{r}'' \rangle \psi_E(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}'' \quad (\text{II. 19})$$

Az itt szereplő $G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}')$ Green függvényt az

$$\langle \vec{r}\vec{R} | \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} | \vec{r}'\vec{R}' \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}') \quad (\text{II. 20})$$

egyenlet definiálja, amely eleget tesz az

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \right) G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{II. 21})$$

egyenletnek.

A (II. 19) egyenlet mindkét oldalára alkalmazva az $\left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \right)$ operátort kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \right) \psi_E(\vec{r}) &= \left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \right) \Phi_E(\vec{r}) + \int \left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \right) G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}') \cdot \\ &\cdot \langle \vec{r}' | V | \vec{r}'' \rangle \psi_E(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}'' \end{aligned} \quad (\text{II. 22})$$

Felhasználva a (II. 20) egyenletet és azt a tényt, hogy $\Phi_E(\vec{r})$ éppen a $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}}$ operátornak E energiához tartozó sajátfüggvénye, eredményül kapjuk, hogy a (II. 19) egyenlet megoldása eleget tesz a (II. 2) alatti Schrödinger egyenletnek. A (II. 20) egyenlet explicit megoldását könnyű meghatározni [17] és eredményül kapjuk, hogy

$$G_E^{(+)}(\vec{r}\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (\text{II. 23})$$

Ezt a kifejezést beírva a (II. 19) egyenletbe és kihasználva azt a feltevést, hogy a potenciál rövidhatótávú, azaz az \vec{r}' szerinti integrálhoz csak egy véges tartományból kapunk zérustól különböző járulékot, meghatározhatjuk $\psi_E(\vec{r})$ aszimptotikus alakját és azt kapjuk, hogy

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \psi_E(\vec{r}) = e^{ikz} + \left[-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \langle \vec{r}' | V | \vec{r}'' \rangle \psi_E(\vec{r}'') \cdot d\vec{r}' d\vec{r}'' \right] \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (\text{II. 24})$$

Ebből egyrészt azt látjuk, hogy $\psi_E(\vec{r})$ valóban eleget tesz a (II. 5) alatt megfogalmazott határfeltételnek, másrészt az $f(\vartheta, \varphi, k)$ szórási amplitúdó konkrét alakját is leolvashatjuk:

$$\begin{aligned} f(\vartheta, \varphi, k) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \langle \vec{r}' | V | \vec{r}'' \rangle \psi_E(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}'' = \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_E | V | \psi_E \rangle \end{aligned} \quad (\text{II. 25})$$

Megállapíthatjuk tehát, hogy a Lippmann—Schwinger egyenlet, mint integrálegyenlet magába foglalja a szükséges határfeltételeket is és így ekvivalens a Schrödinger egyenletnek és a hozzá tartozó határfeltételeknek az együttesével.

II. 3 Green függvény

Vezessük be a (II. 16) és (II. 15) egyenletekhez tartozó Green függvényeket a következő definíciókkal:

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H_0} \quad (\text{II. 26})$$

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (\text{II. 27})$$

ahol z egy komplex szám. Könnyű meggyőződni arról, hogy $G(z)$ mint operátor eleget tesz a

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z) \quad (\text{II. 28})$$

egyenletnek.

Hogy konkrétabb elképzelésünk legyen ezen egyenlet szerkezetéről, írjuk fel impulzus reprezentációban, előbb a benne szereplő operátorokat, majd pedig magát az egyenletet. Bevezetve a $p = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ teljes impulzust és a $\vec{q} = (m_2\vec{k}_1 - m_1\vec{k}_2)/(m_1 + m_2)$ relatív impulzust kapjuk, hogy

$$\langle \vec{p}\vec{q} | G_0(z) | \vec{p}'\vec{q}' \rangle = \left(z - \frac{p^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} \right)^{-1} \delta(\vec{p} - \vec{p}') \delta(\vec{q} - \vec{q}') \quad (\text{II. 29})$$

$$\langle \vec{p}\vec{q} | V | \vec{p}'\vec{q}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \langle \vec{q} | V | \vec{q}' \rangle \quad (\text{II. 30})$$

Ezeket felhasználva (II. 28) a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}\vec{q} | G(z) | \vec{p}'\vec{q}' \rangle &= \left(z - \frac{p^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} \right)^{-1} \delta(\vec{p} - \vec{p}') \delta(\vec{q} - \vec{q}') + \\ &+ \int \left(z - \frac{p^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} \right)^{-1} \langle \vec{q} | V | \vec{q}'' \rangle \langle \vec{p}\vec{q}'' | G(z) | \vec{p}'\vec{q}' \rangle d\vec{q}'' \end{aligned} \quad (\text{II. 31})$$

Innen leolvasható, hogy

$$\langle \vec{p}\vec{q} | G(z) | \vec{p}'\vec{q}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\langle \vec{q} | g \left(z - \frac{p^2}{2M} \right) | \vec{q}' \rangle}{z - \frac{p^2}{2M} - \frac{q^2}{2m}} \quad (\text{II. 32})$$

ahol $\langle \vec{q} | g(z) | \vec{q}' \rangle$ kielégíti a

$$\langle \vec{q} | g(z) | \vec{q}' \rangle = \delta(\vec{q} - \vec{q}') + \int \frac{\langle \vec{q} | V | \vec{q}'' \rangle \langle \vec{q}'' | g(z) | \vec{q}' \rangle}{z - \frac{q''^2}{2m}} d\vec{q}'' \quad (\text{II. 33})$$

egyenletet.

Ezen integrálegyenlet megoldhatóságának elégséges feltétele, hogy a magja négyzetesen integrálható legyen, azaz

$$\int \int |(z - q'^2/2m)^{-1} \langle \vec{q} | V | \vec{q}' \rangle|^2 d\vec{q} d\vec{q}' < \infty \quad (\text{II. 34})$$

z negatív, illetve komplex értékei mellett. Hogy ez a feltétel teljesül-e vagy sem, az a V kölcsönhatás viselkedésétől függ.

Megjegyezzük, hogy rövid hatótávú, korlátozott potenciál esetén a (II. 34) megoldhatósági feltétel biztosítva van.

Ha a (II. 33) egyenlet megoldását ismerjük, akkor (II. 32) alapján megszerkesztjük a $G(z)$ Green függvényt és ekkor voltaképp minden a rendszerre vonatkozó információ a birtokunkban van, mert a $G(z)$ Green függvény segítségével a $|\Psi_E\rangle$ állapotvektort, ennek felhasználásával viszont az összes mérhető mennyiséget kifejezhetjük.

Érvényes ugyanis a

$$|\Psi_E\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} i\varepsilon G(E + i\varepsilon) |\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 35})$$

összefüggés, amit közvetlenül beláthatunk, a következő módon. A (II. 20) egyenletet szorozzuk $i\varepsilon$ -nal z -t helyettesítsük $E + i\varepsilon$ -nal és alkalmazzuk $|\Phi_E\rangle$ -re:

$$i\varepsilon G(E + i\varepsilon) |\Phi_E\rangle = i\varepsilon G_0(E + i\varepsilon) |\Phi_E\rangle + i\varepsilon G_0(E + i\varepsilon) V G(E + i\varepsilon) |\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 36})$$

Ezek után képezzük az $\varepsilon \rightarrow +0$ határátmenetet és vegyük tekintetbe, hogy

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} i\varepsilon G_0(E + i\varepsilon) |\Phi_E\rangle = |\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 37})$$

ami azonnal nyilvánvaló, ha mindkét oldalt megszorozzuk, az $(E - H_0 + i\varepsilon)$ operátorral.

Kapjuk tehát, hogy

$$\lim [i\epsilon G(E+i\epsilon)]|\Phi_E\rangle = |\Phi_E\rangle + \lim G_0(E+i\epsilon)V[i\epsilon G(E+i\epsilon)]|\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 38})$$

Ezt az egyenletet összehasonlítva a (II. 17) alatti Lippmann—Schwinger egyenlettel, azonnal leolvashatjuk, hogy a (II. 35) összefüggés valóban fennáll.

II. 4. Szórási amplitúdó

A szórási jelenségek leírásánál elsősorban nem a hullámfüggvény, hanem a szórási amplitúdó iránt érdeklődünk, mert ez áll közvetlen kapcsolatban a mérhető hatáskeresztmetszettel. A Lippmann—Schwinger egyenlet lehetőséget nyújt arra, hogy belőle közvetlenül a szórási amplitúdót meghatározó egyenletet nyerjünk.

Ebből a célból állítsuk elő a $G(z)$ Green függvényt a következő módon:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T(z)G_0(z). \quad (\text{II. 39})$$

Könnyű belátni (II. 39)-nek (II. 28)-ba való helyettesítésével, hogy az itt szereplő $T(z)$ operátor kielégíti a

$$T(z) = V + VG_0(z)T(z) \quad (\text{II. 40})$$

egyenletet, amit a T operátorra vonatkozó Lippmann—Schwinger egyenletnek szokás nevezni.

A z helyébe $E+i\epsilon$ -t írva a $T(z)$ -re vonatkozó (II. 40) egyenletben, majd ezt alkalmazva a $|\Phi_E\rangle$ állapotvektorra kapjuk, hogy

$$T(E+i\epsilon)|\Phi_E\rangle = V|\Phi_E\rangle + VG_0(E+i\epsilon) \cdot T(E+i\epsilon)|\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 41})$$

A (II. 18) egyenletet megszorozva V -vel a

$$V|\Psi_E\rangle = V|\Phi_E\rangle + VG_0(E+i\epsilon)V|\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 42})$$

egyenlet adódik.

A (II. 41) és (II. 42) egyenletek összehasonlításából leolvashatjuk, hogy

$$T(E+i\epsilon)|\Phi_E\rangle = V|\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 43})$$

Képezve a

$$\langle\Phi'_E|T(E+i\epsilon)|\Phi_E\rangle = \langle\Phi'_E|V|\Psi_E\rangle \quad (\text{II. 44})$$

skalár szorzatot és ezt összehasonlítva a (II. 25) képlettel megállapíthatjuk, hogy a T operátornak a H_0 operátor $|\Phi_E\rangle$ sajátfüggvényeivel képezett mátrixeleme eltekintve a $-m/2\pi\hbar^2$ tényezőtől, éppen a szórási amplitúdót szolgáltatja.

Pontosabban fogalmazva a

$$\langle\Phi'_E|T(z)|\Phi_E\rangle \quad (\text{II. 45})$$

általános mátrixelemek közül az, amelyik az $E' = E$ és $z = E + i0$ feltételeknek eleget tesz, más szóval a T operátor „energia héjon vett” mátrixeleme, arányos a szórási amplitúdóval.

Két szabad részecske fizikai viselkedésének leírására elegendőek a T operátornak „energia héjon vett” mátrixelemei. Kettőnél több részecskéből álló rendszer leírására, amint majd látni fogjuk, szükségünk lesz a rendszert alkotó kétrészecske

alrendszerekre vonatkozó T operátoroknak „nem energia héjon vett” (II. 45) típusú mátrixelemeire is.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a kétrészecske rendszer leírására számos egyenértékű módszer áll rendelkezésünkre, amelyek leltárszerűen felsorolva a következők:

1. Schrödinger egyenlet + határfeltételek a $|\psi_E\rangle$ hullámfüggvényre
2. Lippmann—Schwinger egyenlet a $|\psi_E\rangle$ hullámfüggvényre
3. Lippmann—Schwinger egyenlet a $G(z)$ Green függvényre
4. Lippmann—Schwinger egyenlet a $T(z)$ operátorra.

Ezek után áttérünk a kettőnél több részecskét tartalmazó rendszerek tárgyalására.

III. Háromrészecske-rendszer

III. 1. Lippmann—Schwinger egyenlet

Amint az előző fejezetben láttuk, a Lippmann—Schwinger egyenlet segítségével meghatározhatjuk a kétrészecske-rendszer valamennyi jellemzőjét. Első pillanatra úgy tűnik, hogy kettőnél több részecskét tartalmazó rendszer esetén a Lippmann—Schwinger egyenlet minden nehézség nélkül alkalmazható, hiszen az egyenlet szerkezete a részecskeszámától független. Ez azonban nincs így. Kiderül ugyanis, hogy a Lippmann—Schwinger egyenlet megoldása kettőnél több részecske esetén nem egyértelmű. Hogy világosan álljon előttünk ennek a nehézségnek az oka, vizsgáljuk meg a $G(z)$ Green függvényre vonatkozó

$$G(z) = G_0(z) + K(z)G(z) \quad (\text{III. 1})$$

Lippmann—Schwinger egyenlet magjának a viselkedését három részecskéből álló rendszer esetére, ahol a Hamilton operátort a

$$H = H_0 + V,$$

$$H_0 = T_1 + T_2 + T_3, \quad (\text{III. 2})$$

$$V = V_{12} + V_{13} + V_{23},$$

formulák, az egyenlet magját pedig a

$$K(z) = G_0(z)V \quad (\text{III. 3})$$

formula definiálja.

Impulzus reprezentációban a $K(z)$ mag a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 | K(z) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \vec{k}'_3 \rangle &= \delta(\vec{P} - \vec{P}') \left(z - \frac{k_1^2}{2m_1} - \frac{k_2^2}{2m_2} - \frac{k_3^2}{2m_3} \right)^{-1} \cdot \\ &\cdot [\delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) \langle \vec{q}_{23} | V_{23} | \vec{q}'_{23} \rangle + \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}'_2) \langle \vec{q}_{13} | V_{13} | \vec{q}'_{13} \rangle + \delta(\vec{k}_3 - \vec{k}'_3) \langle \vec{q}_{12} | V_{12} | \vec{q}'_{12} \rangle] \quad (\text{III. 4}) \end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned}\vec{P} &= \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 \\ \vec{q}_{ij} &= \frac{m_i \vec{k}_j - m_j \vec{k}_i}{m_i + m_j}\end{aligned}\quad (\text{III. 5})$$

A rendszer teljes \vec{P} impulzusának megmaradását kifejező $\delta(\vec{P} - \vec{P}')$ függvény, mint tényező előfordul a $G_0(z)$ operátor mátrixelemében, ezért a $G(z)$ Green-operátor is arányos lesz $\delta(\vec{P} - \vec{P}')$ -vel. Következésképp a (III. 4) egyenlet minden tagjában „egyszerűsíthetünk” a közös $\delta(\vec{P} - \vec{P}')$ tényezővel.

Kétrészecske-rendszer esetén, az ezek után visszamaradó (II. 33) integrál-egyenlet magja négyzetesen integrálható volt (legalábbis „tisztességesen” viselkedő potenciál esetén), következésképp az integrál-egyenlet egyértelműen megoldhatónak bizonyult. A helyzet gyökeresen megváltozik, ha kétrészecske-rendszerrel három, vagy több részecskét tartalmazó rendszerre térünk át. A Green függvényre vonatkozó egyenlet magja ugyanis lényegesen szinguláris marad a közös $\delta(\vec{P} - \vec{P}')$ tényező elhagyása után is, az előforduló további δ függvények miatt és ezért az egyenlet nem oldható meg egyértelműen.

A lényegesen szinguláris maggal rendelkező integrálegyenletekre nem érvényes a Fredholm-alternatíva [18], amely szerint vagy az inhomogén egyenletnek van tetszőleges inhomogén tag mellett egyértelmű megoldása; ekkor a homogén egyenletnek csak triviális megoldása van, vagy létezik a homogén egyenletnek nem triviális megoldása; ekkor csak a homogén egyenlet transzponáltjának megoldásaira ortogonális inhomogenitás mellett van az inhomogén egyenletnek megoldása és ez a megoldás nem egyértelmű.

A Lippmann—Schwinger egyenlet tehát kettőnél több részecske esetén lényegesen szinguláris maggal rendelkezvén nem oldható meg egyértelműen. Félreértés elkerülése végett hangsúlyozzuk, hogy a Lippmann—Schwinger egyenlet „helyes” egyenlet: ha valahonnan tudjuk a megoldást, akkor azt az egyenletbe helyettesítve valóban egyenlőséget tapasztalunk. Csupán arról van szó, hogy az egyenlet önmagában nem határozza meg egyértelműen a megoldást, ugyanúgy, mint ahogy pl. a Schrödinger egyenlet is határfeltételek híján csak egy megoldás-sereget definiál.

A Lippmann—Schwinger egyenlet helyett tehát valamilyen hatékonyabb matematikai módszert kell keresni.

Jelenleg ennek a problémának a megoldására, vagy a Faddeev- vagy a Weinberg-féle módszert szokták alkalmazni. Mi a továbbiakban *Faddeev* módszerét [19—20] fogjuk használni. Ennek ellenére célszerűnek látszik röviden vázolni a *Weinberg*-féle eljárás lényegét [21], mert ennek segítségével a probléma fizikai oldala jobban kidomborítható.

III. 2. A Weinberg-féle eljárás

Háromrészecske-rendszer esetén igen célszerű és kényelmes jelölésmód vezethető be a következő módon:

$$V_{\alpha\beta} \equiv V_\gamma; \quad \{\alpha, \beta, \gamma\} = \{1, 2, 3\}; \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha, \quad (\text{III. 6})$$

Szavakban kifejezve: a $V_{\alpha\beta}$ párkölcsönhatás jellemezhető a harmadik, a kölcsönhatásban részt nem vevő részecske γ indexével.

Legyen $V_0 \equiv 0$, ekkor

$$H_0 = T_1 + T_2 + T_3, \quad H_\alpha = H_0 + V_\alpha, \quad \alpha = 0, 1, 2, 3. \quad (\text{III. 7})$$

Itt az α index az ún. reakciócsatornákat különbözteti meg: az α csatornában az α -ik részecske kölcsönhatásmentes tehetetlenségi mozgást végez és csak „passzív nézője” (spectator) a másik két részecske kölcsönhatásának. Az $\alpha = 0$ csatorna megfelel mindhárom részecske szabad mozgásának. Ezek után definiáljuk a $G_\alpha(z)$ Green-függvényt a

$$G_\alpha(z) = \frac{1}{z - H_\alpha} \quad (\text{III. 8})$$

módon, amely eleget tesz a

$$\begin{aligned} G_\alpha(z) &= G_0(z) + G_0(z)V_\alpha G_\alpha(z) \\ G_\alpha(z) &= G_0(z) + G_\alpha(z)V_\alpha G_0(z) \end{aligned} \quad (\text{III. 9})$$

egyenleteknek. Ezek az egyenletek olyan speciális háromrészecske-rendszerek Lippmann—Schwinger egyenletei, amelyeknél a Lippmann—Schwinger egyenlet „szokásos betegsége” nem jelentkezik, mivel a teljes impulzus megmaradását kifejező δ függvényen kívül az α -ik részecske impulzusának megmaradását garantáló függvény is fellép valamennyi tagban. Ezért két δ függvénnyel lehet „egyszerűsíteni”; az így visszamaradó egyenlet magja már nem lesz lényegesen szinguláris; ezért „tisztességes” V_α kölcsönhatást feltételezve, az integrálegyenlet egyértelműen megoldható. Felhasználva a $G_\alpha(z)$ Green-függvényt, definiáljuk az

$$L_\alpha(z) = G_0(z)V_\alpha G_\alpha(z) \quad (\text{III. 10})$$

mennyiséget. Az $L_\alpha(z)$ függvény eleget tesz az

$$\begin{aligned} L_\alpha(z) &= G_0(z)V_\alpha G_0(z) + G_0(z)V_\alpha L_\alpha(z) \\ L_\alpha(z) &= G_0(z)V_\alpha G_0(z) + L_\alpha(z)V_\alpha G_0(z) \end{aligned} \quad (\text{III. 11})$$

egyenleteknek, amelyek a (III. 9) egyenletekhez hasonlóan, ugyanolyan oknál fogva, egyértelműen megoldhatók. Ezek után a $G(z)$ Green-függvényt írjuk fel a

$$G(z) = G_0(z) + L_1(z) + L_2(z) + L_3(z) + C(z) \quad (\text{III. 12})$$

alakban, ahol a $C(z)$ operátort éppen ez az egyenlet definiálja. Kiindulva a $G(z)$ -re vonatkozó

$$G(z) = G_0(z) + G(z)V G_0(z) \quad (\text{III. 13})$$

valamint az $L_\alpha(z)$ -kre vonatkozó (III. 11) egyenletekből és felhasználva $C(z)$ (III. 12) alatti definícióját, leszámaztatható a

$$C(z) = I(z)G(z) \quad (\text{III. 14})$$

egyenlet, ahol

$$I(z) = L_1(V_2 + V_3) + L_2(V_1 + V_3) + L_3(V_1 + V_2). \quad (\text{III. 15})$$

A (III. 14) egyenletben $G(z)$ helyébe a (III. 12) definíciós egyenletet írva kapjuk, hogy

$$C(z) = I(z)G_0(z) + I(z)[L_1(z) + L_2(z) + L_3(z)] + I(z)C(z). \quad (\text{III. 16})$$

Ezen egyenlet $I(z)$ magjának, amint az az impulzus-reprezentációban felírt mátrix-eleméből könnyen leolvasható, nincs lényeges szingularitása, következésképp egyértelműen megoldható.

Összefoglalva az elmondottak lényegét, megállapíthatjuk, hogy míg $G(z)$ -t a

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z) \quad (\text{III. 1})$$

egyenlet nem határozza meg egyértelműen, addig a felbontásban szereplő L_α és C mennyiségeket az

$$L_{\alpha} = G_0 V_{\alpha} G_0 + G_0 V_{\alpha} L_{\alpha} \quad (\text{III. 11})$$

és

$$C = IG_0 + I(L_1 + L_2 + L_3) + IC \quad (\text{III. 16})$$

egyenletek segítségével egyértelműen meg lehet határozni. A Weinberg-módszer lényege tehát abban áll, hogy nem a (III. 1) egyenlet, hanem a (III. 11) és (III. 16) egyenletek megoldása útján állítjuk elő a $G(z)$ Green-függvényt.

A kvantummechanikai többtestprobléma egyenleteinek szerkezetét igen jól lehet szemléltetni gráfok segítségével, sőt lehetséges olyan gráfokat definiálni, amelyek egyértelműen megfeleltethetők az előforduló mennyiségeknek. Ily módon a gráfok úgy tekinthetők, mint a kérdéses mennyiség jelölésére szolgáló szimbólumok.

A gráfok nyelvén tehát az algebrai jelölésmódban felírt egyenletekkel minden tekintetben ekvivalens egyenletek írhatók fel.

Különleges előnyük az algebrai egyenletekkel szemben abban rejlik, hogy sokkal könnyebben tekinthetők át.

Vegyük szemügyre például a $G(z)$ Green függvényt meghatározó Lippmann—Schwinger egyenletet:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z). \quad (\text{III. 1})$$

Feltételezve, hogy háromrészeske-rendszerről van szó, vezessük be a következő „szótárt”:

$$\begin{aligned} G_0(z) &\rightarrow \text{three horizontal lines} \\ G(z) &\rightarrow \text{three horizontal lines with a circle labeled } G \text{ in the middle} \\ K(z) = G_0(z) V &\rightarrow \text{three horizontal lines with a circle labeled } K \text{ in the middle} = \text{three horizontal lines with a vertical line through the middle} + \text{three horizontal lines with a vertical line through the middle} + \text{three horizontal lines with a vertical line through the middle} \end{aligned} \quad (\text{III. 17})$$

A (III. 1) egyenlet a gráfok nyelvén tehát a következőképp alakul:

$$\text{---} \circ \text{---} = \text{---} + \text{---} \circ \text{---} \quad (\text{III. 18})$$

Egy pillanatra tételezzük fel, hogy az (III. 1) egyenlet iterációval megoldható és írjuk fel az iterációs sort:

$$G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots \quad (\text{III. 19})$$

Gráf nyelven:

$$\begin{aligned}
 \text{---} \bigcirc \text{---} &= \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots
 \end{aligned} \tag{III. 20}$$

Rendezzük át a (III. 20) alatti iterációs sort és részenként összegezzük:

$$\begin{aligned}
 \text{---} \bigcirc \text{---} &= \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \\
 &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \\
 &= \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \\
 &+ \text{---} \text{---}
 \end{aligned} \tag{III. 21}$$

Innen leolvasható, hogy a $G(z)$ Green-függvénynek megfelelő gráf topológiailag össze-nem-függő gráfokat is tartalmaz. Ez annak a következménye, hogy a $G(z)$ -t meghatározó egyenletnek (III. 17) alatt megadott $K(z)$ magját topológiailag össze-nem-függő gráfok összege alkotja.

A Lippmann—Schwinger egyenlettel kapcsolatos nehézség éppen ebből a körülményből származik. A topológiailag összefüggő gráfokhoz egyetlen, a teljes impulzus megmaradását kifejező δ függvény tartozik. A topológiailag össze-nem-függő gráfokhoz további δ függvények tartoznak, amelyek kifejezésre juttatják az impulzus-megmaradást az egyes független (kölcsonhatásban nem álló) részrendszerekre vonatkozólag.

A probléma lényegét jól megvilágítja a következő kijelentés: A Lippmann—Schwinger egyenlet egyértelmű megoldhatóságával nem volna baj akkor, ha a két-részecske-rendszerben *csak* kéttest-erők, a három-részecske rendszerben *csak* háromtest-erők, az n részecske-rendszerben pedig *csak* n -test-erők léteznének. Ekkor ugyanis csak topológiailag összefüggő gráfok fordulnának elő és a fellépő egyetlen δ függvényt az integrálegyenlet minden tagjából elhagyva nem lényegesen szinguláris magú, azaz egyértelműen megoldható integrálegyenlethez jutnánk.

Minthogy a kétrészecske-rendszerben kéttest-erők hatnak, ezért a Lippmann—Schwinger egyenlettel nincs is baj. A háromrészecske-rendszerben a bajt az okozza, hogy amíg mondjuk ez egyes és kettes részecske között a kéttest-erő közvetítette kölcsönhatás lejátszódik, addig a hármas számú részecske csak passzív szemlélő (spectator), következésképp az impulzusa változatlan marad. Ez behoz egy δ függvényt, ami azután az integrálegyenlet magjának lényeges szingularitását idézi elő.

Az iterációs sor átrendezése és részenkénti felösszegezése alapján kapott (III. 21) alatti egyenlet természetesen csak akkor lenne érvényes, ha az iterálhatóság feltétele teljesülne. Ez azonban éppen nem teljesedik, hiszen a Lippmann—Schwinger egyenlet magja lényegesen szinguláris, tehát a Neumann-sor ab ovo nem lehet konvergens.

Weinberg azonban felismerte, hogy az iterációval kapott eredmény helyesen tükrözi a $G(z)$ Green-függvénynek megfelelő gráf topológiai szerkezetét és útmutatást ad arra, hogy hogyan kell a $G(z)$ Green-függvényt felbontani úgy, hogy az alkatrészei, nevezetesen az L_1 , L_2 , L_3 és C mennyiségek egyértelműen megoldható integrálegyenleteknek tegyenek eleget.

Ezek után áttérünk a Weinberg-féle módszerrel elvben egyenértékű, de az alkalmazások szempontjából előnyösebb Faddeev-féle módszer rövid összefoglalására.

III. 3. A Faddeev-féle eljárás

Amint az előző szakaszban láttuk, a $G(z)$ Green-függvényre vonatkozó Lippmann—Schwinger egyenlet magja háromrészecske-rendszer esetén lényegesen szinguláris, következésképp megoldása nem egyértelmű. Arra kell tehát törekednünk, hogy $G(z)$ -nak megtaláljuk egy olyan célszerű előállítását, amely előállításban szereplő alkatrészek már egyértelműen meghatározhatók.

Ebből a célból vegyük szemügyre a kétrészecske-rendszer $G(z)$ Green-függvényének a (II. 39) alatt felírt

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T(z)G_0(z) \quad (\text{II. 39})$$

előállítását és kíséreljük meg ennek az általánosítását háromrészecske-rendszer esetére.

Induljunk ki a (III. 1) és (III. 9) egyenletekből:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z) \quad (\text{III. 1})$$

$$G_\alpha(z) = G_0(z) + G_0(z)V_\alpha G_\alpha(z). \quad (\text{III. 9})$$

A $G(z)$ és $G_\alpha(z)$ Green-függvények között, amint az könnyen belátható, érvényesek a

$$G(z) = G_\alpha(z) + G_\alpha(z)(V - V_\alpha)G(z) \quad (\text{III. 22})$$

$$G(z) = G_\alpha(z) + G(z)(V - V_\alpha)G_\alpha(z) \quad (\text{III. 23})$$

összefüggések.

Behelyettesítve (III. 23)-at a (III. 22) egyenlet jobb oldalába, kapjuk, hogy

$$G(z) = \delta_{\alpha\beta} G_\alpha(z) + G_\alpha(z)U_{\alpha\beta}(z)G_\beta(z) \quad (\text{III. 24})$$

ahol

$$U_{\alpha\beta}(z) = (1 - \delta_{\alpha\beta})(z - H_\beta) + (V - V_\alpha) + (V - V_\alpha)G(z)(V - V_\beta). \quad (\text{III. 25})$$

A (III. 24) és a (II. 39) egyenletek szerkezetét összehasonlítva bizonyos analógiát lehet felismerni a $T(z)$ és az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorok között.

A kétrészecske-rendszer esetén, amint láttuk a Green-függvény meghatározását vissza lehetett vezetni a $T(z)$ meghatározására, más szóval a (II. 40) egyenlet megoldására.

Az említett formai analógia alapján feltehetjük a kérdést: vissza lehet-e vezetni a háromrészecske-rendszer Green-függvényének megszerkesztését az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorok meghatározására, más szóval le lehet-e származtatni olyan egyenleteket, amelyek egyértelműen meghatározzák az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorokat? Faddeev bebizonyította, hogy ez lehetséges. Az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorokat meghatározó egyenleteket nevezik Faddeev-egyenleteknek és most azt tűzzük ki célul, hogy ezeket az egyenleteket leszámazzassuk.

Előkészítésül vezessük be a $\mathcal{T}_\gamma(z)$ operátort, amelyet a

$$\mathcal{T}_\gamma(z) = V_\gamma + V_\gamma G_0(z) \mathcal{T}_\gamma(z) \quad (\text{III. 26})$$

egyenlet definiál. Ezen egyenletet összehasonlítva a (II. 40) alatti egyenlettel, világosan látszik, hogy $\mathcal{T}_\gamma(z)$ nem egyéb, mint $T(z)$ általánosítása, nevezetesen olyan kétrészecske kölcsönhatásnak a T operátora, amely kölcsönhatás egy háromrészecske-rendszerben zajlik úgy, hogy a harmadik, γ indexszel ellátott részecske tehetetlenségi mozgást végez és csak passzív szemlélője (spectator) a másik két részecske kölcsönhatásának.

A (III. 9) egyenletből következik, hogy kielégíti a

$$V_\gamma G_\gamma(z) = \mathcal{T}_\gamma(z) G_0(z) \quad (\text{III. 27})$$

egyenletet.

Ezen előkészítés után helyettesítsük be a (III. 22) egyenletbe (III. 24)-et és szorozzuk balról a $(z - H_\alpha)$ és jobbról a $(z - H_\beta)$ operátorral:

$$(z - H_\beta) \delta_{\alpha\beta} + U_{\alpha\beta}(z) = (z - H_\beta) + \sum_\gamma (1 - \delta_{\gamma\alpha}) (V_\gamma \delta_{\gamma\beta} + V_\gamma G_\gamma(z) U_{\gamma\beta}(z)) \quad (\text{III. 28})$$

Felhasználva a (III. 27) alatti összefüggést, eredményül kapjuk a Faddeev-féle egyenleteket:

$$U_{\alpha\beta}(z) = (1 - \delta_{\alpha\beta})(z - H_0) + \sum_\gamma (1 - \delta_{\alpha\gamma}) \mathcal{T}_\gamma(z) G_0(z) U_{\gamma\beta}(z) \quad (\text{III. 29})$$

Az egyenlet szerkezete könnyebben áttekinthető, ha mátrixalakban írjuk fel:

$$\begin{bmatrix} U_{0\beta} \\ U_{1\beta} \\ U_{2\beta} \\ U_{3\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - \delta_{0\beta})(z - H_0) \\ (1 - \delta_{1\beta})(z - H_0) \\ (1 - \delta_{2\beta})(z - H_0) \\ (1 - \delta_{3\beta})(z - H_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{T}_1 G_0 & \mathcal{T}_2 G_0 & \mathcal{T}_3 G_0 \\ 0 & 0 & \mathcal{T}_2 G_0 & \mathcal{T}_3 G_0 \\ 0 & \mathcal{T}_1 G_0 & 0 & \mathcal{T}_3 G_0 \\ 0 & \mathcal{T}_1 G_0 & \mathcal{T}_2 G_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{0\beta} \\ U_{1\beta} \\ U_{2\beta} \\ U_{3\beta} \end{bmatrix} \quad (\text{III. 30})$$

Innen leolvasható, hogy összesen 16 különböző $U_{\alpha\beta}(z)$ operátor létezik, ezek közül azonban csak 12 független. Az $U_{0\beta}(z)$ operátorok mindig kifejezhetők az $U_{\alpha\beta}(z)$ ($\alpha \neq 0$) operátorok segítségével:

$$U_{0\beta} = (1 - \delta_{0\beta})(z - H_0) + \mathcal{T}_1 G_0 U_{1\beta} + \mathcal{T}_2 G_0 U_{2\beta} + \mathcal{T}_3 G_0 U_{3\beta}. \quad (\text{III. 31})$$

Rögzített β mellett tehát 3 független mennyiséget kell meghatározni, egy három egyenletből álló egyenletrendszer segítségével:

$$\begin{bmatrix} U_{1\beta} \\ U_{2\beta} \\ U_{3\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - \delta_{1\beta})(z - H_0) \\ (1 - \delta_{2\beta})(z - H_0) \\ (1 - \delta_{3\beta})(z - H_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{T}_2 G_0 & \mathcal{T}_3 G_0 \\ \mathcal{T}_1 G_0 & 0 & \mathcal{T}_3 G_0 \\ \mathcal{T}_1 G_0 & \mathcal{T}_1 G_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1\beta} \\ U_{2\beta} \\ U_{3\beta} \end{bmatrix} \quad (\text{III. 32})$$

A továbbiakban ezen egyenletrendszer legfontosabb tulajdonságaival fogunk foglalkozni, nevezetesen be fogjuk látni, hogy

1. az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátor adott kezdő- és végállapotok között vett $\langle \Phi_{\alpha\alpha} | U_{\alpha\beta} | \Phi_{\beta\beta} \rangle$ típusú mátrixeleme közvetlenül az adott állapotok közötti átmenet valószínűségi amplitúdóját szolgáltatja.
2. A (III. 32) alatti operátoregyenletek olyan integrálegyenletekre vezetnek, amelyek magjai, ellentétben a Lippmann—Schwinger egyenlet magjával, már nem tartalmaznak lényeges szingularitást, tehát egyértelműen megoldhatók.

Avégből, hogy az 1. pont alatti állítás igaz voltát belássuk, idéznünk kell a szóráselmélet egyik alapvető formuláját [22], amely szerint az

$$\begin{aligned} [E_b - H_\beta] | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle &= 0, \\ [E_a - H_\alpha] | \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III. 33})$$

egyenleteknek eleget tevő $| \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle$ kezdőállapotból a $| \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle$ végállapotba való átmenet S -mátrixeleme a következőképp írható fel:

$$\langle \Phi_{\alpha a}(E_a) | S | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle = \langle \Psi_{\alpha a}^{(-)}(E_a) | \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle, \quad (\text{III. 34})$$

ahol $| \Psi_{\alpha a}^{(-)}(E_a) \rangle$ és $| \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle$ kielégítik a

$$| \Psi_{\alpha a}^{(-)}(E_a) \rangle = | \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle + \frac{1}{E_a - H_\alpha - i\varepsilon} (V - V_\alpha) | \Psi_{\alpha a}^{(-)}(E_a) \rangle, \quad (\text{III. 35})$$

$$| \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle = | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle + \frac{1}{E_b - H_\beta + i\varepsilon} (V - V_\beta) | \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle \quad (\text{III. 36})$$

Lippmann—Schwinger egyenleteket.

A Lippmann—Schwinger egyenlet

$$| \Psi_{\alpha a}^{(\pm)}(E_a) \rangle = | \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle + \frac{1}{E_a - H \pm i\varepsilon} (V - V_\alpha) | \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle \quad (\text{III. 37})$$

explicit „megoldásait” felhasználva, könnyű belátni, hogy fennáll a

$$| \Psi_{\alpha a}^{(-)}(E_a) \rangle - | \Psi_{\alpha a}^{(+)}(E_a) \rangle = 2\pi i \delta(E_a - H) (V - V_\alpha) | \Phi_{\alpha a}(E_a) \rangle \quad (\text{III. 38})$$

összefüggés.

Itt kihasználtuk a jólismert

$$\frac{1}{x - x' \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{x - x'} \mp i\pi \delta(x - x') \quad (\text{III. 39})$$

relációt.

A (III. 38) összefüggést felhasználva a (III. 34) alatt felírt S -mátrixelem a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\alpha a}(E_a) | S | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle &= \langle \Psi_{\alpha a}^{(+)}(E_a) | \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle - 2\pi i \delta(E_a - E_b) \langle \Phi_{\alpha a}(E_a) | V - V_\alpha | \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle = \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{ab} \delta(E_a - E_b) - 2\pi i \delta(E_a - E_b) T_{\alpha a \beta b} \end{aligned} \quad (\text{III. 40})$$

Itt felhasználtuk a $|\Psi_{\alpha a}^{(+)}(E_a)\rangle$ függvények (δ függvény értelemben vett) ortonormáltságát és bevezettük a

$$T_{\alpha a \beta b} = \langle \Phi_{\alpha a}(E_a) | V - V_\alpha | \Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b) \rangle \quad (\text{III. 41})$$

jelölést.

A $|\Psi_{\beta b}^{(+)}(E_b)\rangle$ -re vonatkozó, a (III. 37)-tel analóg „explicit” előállítást felhasználva a T -mátrixelem a

$$T_{\alpha a \beta b} = \langle \Phi_{\alpha a}(E_b) | (V - V_\alpha) + (V - V_\alpha) \frac{1}{E_b - H + i\varepsilon} (V - V_\beta) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle \quad (\text{III. 42})$$

alakra hozható. Itt már figyelembe vettük, hogy az S -mátrix kifejezésében szereplő $\delta(E_a - E_b)$ tényező miatt $E_a = E_b$. Összehasonlítva a T -mátrixelemnek ezt a kifejezését az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátor (III. 25) alatti explicit alakjával, azt találjuk, hogy

$$T_{\alpha a \beta b} = \langle \Phi_{\alpha a}(E_b) | U_{\alpha\beta}(E_b + i\varepsilon) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle \quad (\text{III. 43})$$

Azt kaptuk tehát, hogy az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátornak az $E_a = E_b$ és $z = E_a + i\varepsilon$ feltételeket kielégítő mátrixeleme, vagy röviden szólva az energiahéjon vett mátrixeleme éppen megegyezik a T -mátrixelemmel, azaz adott kezdő állapotból, adott végállapotba való átmenet valószínűségi amplitúdójával. Ezzel az 1. alatti állítást bebizonyítottuk.

Ha tehát a Faddeev egyenletek megoldásával meghatározzuk az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorokat, akkor már belőlük nem is szükséges és nem is érdemes a $G(z)$ operátort megkonstruálni, mert az $U_{\alpha\beta}(z)$ operátorok energiahéjon vett mátrixelemeinek a segítségével a mérhető mennyiségek, azaz a hatáskeresztmetszetek közvetlenül kifejezhetők.

Ezek után áttérünk a 2. alatti kijelentés elemzésére, mely szerint a Faddeev egyenletek ellentétben a Lippmann—Schwinger egyenlettel *egyértelműen* oldhatók meg.

Először is szorozzuk meg a (III. 29) alatti operátor egyenletet jobbról, rögzített β mellett, a $|\Phi_{\beta b}(E_b)\rangle$ kezdőállapotvektorral, balról pedig a $\langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha \vec{P} |$ impulzus sajátállapotvektorral:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha \vec{P} | U_{\alpha\beta}(z) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle &= (1 - \delta_{\alpha\beta})(z - p_\alpha^2 - q_\alpha^2 - P^2) \langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha \vec{P} | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle + \\ &+ \sum_\gamma (1 - \delta_{\alpha\gamma}) \int \frac{\langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha \vec{P} | \mathcal{T}_\gamma(z) | \vec{p}'_\gamma \vec{q}'_\gamma \vec{P} \rangle \langle \vec{p}'_\gamma \vec{q}'_\gamma \vec{P} | U_{\alpha\beta}(z) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle}{z - p'^2_\gamma - q'^2_\gamma - P'^2} d\vec{p}'_\gamma d\vec{q}'_\gamma d\vec{P}, \end{aligned} \quad (\text{III. 44})$$

ahol

$$\begin{aligned} \vec{P} &= \frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3}{\sqrt{2(m_1 + m_2 + m_3)}}, \\ \vec{q}_\alpha &= \frac{m_\gamma \vec{k}_\beta - m_\beta \vec{k}_\gamma}{\sqrt{2m_\beta m_\gamma(m_\beta + m_\gamma)}}, \\ \vec{p}_\alpha &= \frac{m_\alpha(\vec{k}_\beta + \vec{k}_\gamma) - (m_\beta + m_\gamma)\vec{k}_\alpha}{\sqrt{2m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)(m_\alpha + m_\beta + m_\gamma)}}. \end{aligned} \quad (\text{III. 45})$$

Az itt szereplő kétrészecske T -mátrixelem a következő alakba írható:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha, \vec{P} | \mathcal{T}_\gamma(z) | \vec{p}'_\gamma, \vec{q}'_\gamma, \vec{P}' \rangle = \\ & = \delta(\vec{P} - \vec{P}') \delta(\vec{p}_\gamma(\vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha) - \vec{p}'_\gamma) \langle \vec{q}_\gamma(\vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha) | \mathcal{T}_\gamma(z) | \vec{q}'_\gamma \rangle, \end{aligned} \quad (\text{III. 46})$$

ahol $\delta(\vec{p}_\gamma(\vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha) - \vec{p}'_\gamma)$ a kétrészecske-rendszer, $\delta(\vec{P} - \vec{P}')$ pedig a háromrészecske-rendszer teljes impulzusának megmaradását fejezi ki. Teljesen nyilvánvaló, hogy így a harmadik, a kölcsönhatásban részt nem vevő (spectator) részecske impulzusának megmaradása is automatikusan biztosítva van. A (III. 44) egyenlet tehát tömegközépponti koordináta rendszert ($\vec{P} = 0$) használva a következőképp alakul:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha | U_{\alpha\beta}(z) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle = (1 - \delta_{\alpha\beta})(z - p_\alpha^2 - q_\alpha^2) \langle \vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle + \\ & + \sum_\gamma (1 - \delta_{\alpha\gamma}) \int \frac{\langle \vec{q}_\gamma(\vec{p}_\alpha \vec{q}_\alpha) | \mathcal{T}_\gamma(z) | \vec{q}'_\gamma \rangle \langle \vec{p}_\gamma \vec{q}'_\gamma | U_{\gamma\beta}(z) | \Phi_{\beta b}(E_b) \rangle}{z - p_\gamma^2 - q_\gamma'^2} d\vec{q}'_\gamma \end{aligned} \quad (\text{III. 47})$$

Ebből látszik, hogy az integrálegyenletrendszer magjai lényeges szingularitást nem tartalmaznak, így az egyenletrendszer egyértelmű megoldhatóságának egyik szükséges feltétele biztosítva van. Itt most nem foglalkozunk annak bizonyításával, hogy az egyértelmű megoldhatóság *elégséges* feltétele is valóban teljesül, ehelyett Faddeev [19], illetve Lovelace [23] munkáira utalunk, amelyekben bebizonyítják, hogy a Faddeev-féle egyenletek a z paraméter valós negatív, illetve komplex értékei mellett egyértelműen megoldhatók, feltéve, hogy a kétrészecske kölcsönhatás V_α potenciálja „tisztessegesen” viselkedik.

Amint az (III. 47) egyenlet szerkezetéből könnyen kiolvasható, az $U_{\gamma\beta}(z)$ operátorok mátrixelemei tömegközépponti koordináta rendszerben, rögzített kezdő-állapot esetén két vektorváltozótól függenek.

Gömbfüggvények szerinti sorfejtést alkalmazva, a két vektorváltozótól függő integrálegyenletek két skalárváltozótól függő integrálegyenletrendszerré alakíthatók át.

IV. Sokrészecske-rendszer

IV. 1. A módszerek csoportosítása

A kéttest-probléma megoldására szolgáló módszerek, amint láttuk, matematikai formanyelv tekintetében különböznek ugyan egymástól, fizikailag azonban teljesen egyenértékűek. Hasonló kijelentés tehető a háromtest-probléma esetében is. Ezzel szemben a soktest rendszerekben lezajló magreakciók leírására olyan sokfajta megközelítési mód, illetve felfogás alakult ki, hogy ezeket csak felsorolni is nehéz lenne. Még nehezebb, sőt gyakorlatilag lehetetlen a különböző megközelítési módok egymáshoz való pontos viszonyát megállapítani.

Ezen a helyen mi csupán arra vállalkozunk, hogy röviden jellemezzük a magreakció elméletek három fő irányzatát. A három fő irányzatot tömören az „exakt” a „formális” és a „dinamikus” nevekkel lehet megjelölni.

Az „exakt” magreakció elméletek

Tömegközépponti koordináta rendszert használva a kéttest-probléma egytest-problémára redukálódik. Ezzel szemben a háromtest rendszer már triviális módon nem egyszerűsíthető, „valódi” sokrészecske rendszert alkot. Ezért remélhető, hogy azok a módszerek, amelyek megfogalmazhatók és alkalmazhatók $n=3$ -ra, általánosíthatók tetszőleges n -számú részecskéből álló rendszerre is. Hunzikernek [24] valóban sikerült kimutatnia, hogy a Weinberg-féle eljárás háromrészecske rendszerről tetszőleges n -részecske rendszerre általánosítható. A Faddeev-féle eljárás esetére az általánosítás módját Jakubovski [25] találta meg.

Ez tehát azt jelenti, hogy a magreakciók problémájának ma már létezik olyan exakt megfogalmazása, amely matematikailag jól definiált fogalmakra épül.

Azonnal felmerül azonban az elmélet használhatóságának a kérdése. Amint az előző fejezetben láttuk, ahhoz, hogy a háromrészecske rendszernek fizikai és matematikai szempontból egyaránt kielégítő leírásához egyáltalán hozzákezdhessünk, ismerni kell a lehetséges kétrészecske alrendszerek T -mátrixát teljes általánosságban, azaz az energiahéjon is és azon kívül is. Ebből minden matematikai megfontolás nélkül, tisztán analógia alapján várható, hogy az n -részecske-probléma megfogalmazásához szükség van az összes lehetséges $n-1$, $n-2$, s i.t. részecskés alrendszerek komplett ismeretére. A matematikai módszerek és a számítástechnika jelenlegi fejlettségi fokán a magfizikai háromtest-probléma bizonyos egyszerűsítő feltevések árán már ma megoldható. Várható, hogy a kölcsönhatások alakjára vonatkozó egyszerűsítő feltevések zöme a közeljövőben elhagyható lesz. Az viszont teljesen valószínűtlen, hogy az n -test-probléma közelítésmentesen megoldható legyen a közeljövőben akár $n=4$ -re, akárcsak a legvérszegényebb kölcsönhatás esetére is.

Egyelőre azzal az örömmel kell beérnünk, hogy kezünkben van a tetszőleges n -számú részecskéből álló rendszerben lezajló reakciók problémájának exakt megfogalmazása.

A „formális” magreakció-elméletek

Léteznek a magfizikai sokrészecske-problémának más, ugyancsak exakt, ún. formális megközelítései is, mint amilyenek például a Kapur—Peierls [3], a Wigner—Eisenbud [4], vagy az Humblet—Rosenfeld [5]-féle elméletek.

Ezen elméletek nem azt tekintik fő feladatuknak, hogy a kétnukleon-kölcsönhatásból kiindulva végigvihető módszert adjanak a különböző S -mátrixelemek, illetve hatáskeresztmetszetek pontos vagy közelítő meghatározására. Sokkal inkább azt tűzik ki célul, hogy a kétnukleon kölcsönhatásra vonatkozó ismereteink közül kiválasztva a leglényegesebbet, nevezetesen azt, hogy a magkölcsönhatások rövidhatótávúak, az S -mátrix formális sajátosságait határozzák meg. Az S -mátrix leszámaztatása során a következő feltevéseket teszik:

1. a magkölcsönhatások rövid hatótávúak;
2. a nem-relativisztikus kvantummechanika alkalmazható;
3. a sokrészecske-rendszer kettőnél több fragmentumra nem eshet szét, még időlegesen (virtuálisan) sem.

Az első feltevés helyességében nem kételkedünk, ez a magfizikai ismereteink közül a legmegbízhatóbb. A második feltevés általánosan elfogadott munkahipotézis, amelynek helyességét kétségbe lehet ugyan vonni, de csak a fizika magasabb fej-

lettségi fokán lehet valami mással helyettesíteni. A harmadik feltevés közös vonása nemcsak a formális elméleteknek, hanem gyakorlatilag az összes magreakció elméletnek és igen lényeges szerepet játszik, mert ezen feltevés nélkül az eddig létező elméletek megfogalmazása lehetetlen lett volna. Sajnálatos tény, hogy ez a feltevés biztosan hibás. Legfeljebb remélni lehet, hogy alacsony energián, amikor a kettőnél több fragmentumra való szétesés energetikai okoknál fogva erősen tiltott, ez a kvalitatív hibás feltevés, kvantitatív csak mérsékelten hibás eredményekhez vezet. A formális magreakció elméletek az első megfogalmazásuk óta eltelt három évtizedben igen gyümölcsözőnek bizonyultak, de ugyanezen idő alatt a hátrányaik is egyre élesebben kiütköztek. Legfőbb közös hátrányuk, hogy az S -mátrix előállítása során végtelen sorfejtésekkel bevezetett paraméterek nem hozhatók közvetlen kapcsolatba a sokrészecske rendszer mozgását megszabó kölcsönhatással. A másik lényeges hátrány, hogy az elméletben előforduló paramétereket legfeljebb csak elvileg lehet kiszámítani, a gyakorlatban a paramétereket a kísérleti adatokhoz való illesztéssel határozzák meg [26].

A „dinamikus” magreakció elméletek

Az „exakt” és a „formális” elméletekben előforduló gyakorlati, illetve elvi nehézségek miatt az utóbbi évtizedben egyre inkább tért hódít az a felfogás, hogy a sokrészecske rendszerben lezajló reakciók leírására nem olyan módszereket kell alkalmazni, amelyek exakt megfogalmazásukkal tűnnek ki, hanem inkább olyan módszereket, amelyek alkalmas keretet szolgáltatnak fizikai feltevések megfogalmazására és a leírásba való beépítésére és ugyanakkor numerikusan számolhatóak.

Az alacsony energiával járó gerjesztések, illetve alacsony energián lezajló folyamatok megértésére, illetve leírására a magfizika jelenlegi fejlettségi szintjén a héjmodell látszik a legalkalmasabbnak. Húsz évvel ezelőtt a héjmodell teljesen egyértelműen definiált fogalmat jelentett. Azóta a héjmodellnek számos változata alakult ki és ma már a „héjmodell” gyűjtőfogalom alá tartozik minden olyan magmodell, amely felhasználja a független egyrészecske állapotok fogalmát. Eredetileg a héjmodell a kötött állapotoknak, elsősorban az állapotállapotoknak az értelmezésére volt „szánva”. Időközben sikerült kidolgozni azonban olyan változatait, amelyek alkalmas keretet szolgáltatnak a magreakciókkal kapcsolatos problémák megfogalmazására is. A héjmodellnek ilyen irányú kiterjesztéseivel itt most nem foglalkozunk, ehelyett inkább *Mahaux* és *Weidenmüller* kitűnő könyvére utalunk [27].

A továbbiakban figyelmünket a magreakciók elméletének egy *Feshbach*-tól származó [8], [28] megfogalmazására fordítjuk, amely alkalmas keretet szolgáltat arra, hogy a nukleáris rendszer strukturális és dinamikai tulajdonságaira vonatkozó ismereteinket, a héjmodellből, a kollektív modellből, az optikai modellből és más egyéb forrásokból származó információinkat, egy egységes egésszé ötvözzük össze.

IV. 2. A Feshbach-féle általános magreakció elmélet

A következőkben a nukleon szórásproblémáját fogjuk vizsgálni, A -számú nukleonból álló, alapállapotban levő targetmag esetén.

A szórásprobléma tárgyalásánál az $A + 1$ nukleonból álló rendszer

$$[E - H]|\Psi\rangle = 0 \quad (\text{IV. 1})$$

Schrödinger-egyenletének a szórásfolyamatot leíró megoldását célirányos az A nukleonból álló rendszer lehetséges $\varphi_i(x_1 \dots x_A)$ állapotai szerint kifejezni:

$$\langle x | \Psi \rangle = \mathcal{A} \left[\sum_i u_i(x_0) \varphi_i(x_1 \dots x_A) \right], \quad (\text{IV. 2})$$

ahol \mathcal{A} az antiszimmetrizálás operátora. Az energiaskálát úgy választjuk meg, hogy a targetmag $\varphi_0(x_1 \dots x_A)$ alapállapotához zérus energiaérték tartozzék: $\varepsilon_0 = 0$. A rendszer teljes E energiája tehát a bombázó nukleon kinetikus energiájával egyezik meg. Ha E kisebb, mint a targetmag első gerjesztett állapotának energiája, azaz $E < \varepsilon_1$, akkor csak rugalmas szórás fordulhat elő. Ebben az esetben $u_0(x_0)$ aszimptotikusan egy beeső síkhullámot és kifutó gömbhullámot tartalmaz és valamennyi $u_i(x_0)$ ($i \neq 0$) függvény a végtelenben exponenciálisan lecseng. Olyan E energiaértéknél, amelynél már rugalmatlan folyamatok is előfordulhatnak ($E > \varepsilon_1$), az $u_i(x_0)$ ($i \neq 0$) függvények közül bizonyosak aszimptotikusan kifutó gömbhullámként viselkednek.

Rugalmas szórás esetén valamennyi mérhető mennyiségre vonatkozó információt az $u_0(x_0)$ függvény magába foglalja. Éppen ezért célszerű a rendszer hullámfüggvényét két egymásra ortogonális komponensre bontani, amelyek közül az egyik csupán a rugalmas szórásnak megfelelő $u_0(x_0)$ és a target alapállapotának megfelelő $\varphi_0(x_1 \dots x_A)$ függvényt tartalmazza:

$$\langle x | \Psi \rangle = \mathcal{A} [u_0(x_0) \varphi_0(x_1 \dots x_A)] + \mathcal{A} \left[\sum_{i \neq 0} u_i(x_0) \varphi_i(x_1 \dots x_A) \right]. \quad (\text{IV. 3})$$

Feshbach nyomán bevezetjük a P és Q projekciós operátorokat, amelyek ezt a felbontást megvalósítják:

$$\langle x | P | \Psi \rangle = \mathcal{A} [u_0(x_0) \varphi_0(x_1 \dots x_A)] \quad (\text{IV. 4})$$

$$\langle x | Q | \Psi \rangle = \mathcal{A} \left[\sum_{i \neq 0} u_i(x_0) \varphi_i(x_1 \dots x_A) \right]. \quad (\text{IV. 5})$$

A hullámfüggvény két komponensének meghatározására csatolt egyenletrendszer kapunk:

$$[E - H_{PP}] |\Psi_P\rangle = H_{PQ} |\Psi_Q\rangle, \quad (\text{IV. 6})$$

$$[E - H_{QQ}] |\Psi_Q\rangle = H_{QP} |\Psi_P\rangle, \quad (\text{IV. 7})$$

ahol

$$H_{PP} = PHP, \quad H_{QP} = QHP, \quad |\Psi_P\rangle = P |\Psi\rangle,$$

$$H_{QQ} = QHQ, \quad H_{PQ} = PHQ, \quad |\Psi_Q\rangle = Q |\Psi\rangle.$$

Ezen egyenletrendszer segítségével a hullámfüggvény két komponensére az

$$[E - H_{PP}] |\Psi_P\rangle = H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP} |\Psi_P\rangle \quad (\text{IV. 8})$$

$$[E - H_{QQ}] |\Psi_Q\rangle = H_{QP} \frac{1}{E - H_{PP} + i\varepsilon} H_{PQ} |\Psi_Q\rangle + H_{QP} |\chi\rangle \quad (\text{IV. 9})$$

egyenleteket nyerjük, ahol $|\chi\rangle$ megoldása az

$$[E - H_{PP}] |\chi\rangle = 0$$

homogén egyenletnek. $|\chi\rangle$ aszimptotikusan alapállapotban levő targetmagot, beeső síkhullámot és kifutó gömbhullámokat ír le, más szóval ugyanazon határfeltételeknek tesz eleget, mint $|\Psi_P\rangle$. A $|\Psi_P\rangle$ -re vonatkozó egyenletet a határfeltételeket is magába foglaló Lippmann–Schwinger-típusú integrálegyenletté alakíthatjuk:

$$|\Psi_P^{(+)}\rangle = |\chi^{(+)}\rangle + \frac{1}{E - H_{PP} + i\varepsilon} \left[H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP} \right] |\Psi_P^{(+)}\rangle. \quad (\text{IV. 10})$$

Ebből az egyenletből kiindulva a rugalmas szórás T -mátrixára a szokásos eljárással a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{fi} = & \langle \eta_f | H_{PP} - H_0 | \chi_i^{(+)} \rangle + \\ & + \langle \chi_f^{(-)} | H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ} - H_{QP} \frac{1}{E - H_{PP} + i\varepsilon} H_{PQ}} H_{QP} | \chi_i^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV. 11})$$

Az i és f indexek a kezdeti és végállapotot kimerítően jellemző kvantumszámok jelölésére szolgálnak. H_0 a targetmagból és a bombázó nukleonból álló kölcsönhatásmentes rendszer Hamilton-operátora, $|\eta_f\rangle$ pedig H_0 sajátfüggvényét jelöli. $\langle \eta_f | H_{PP} - H_0 | \chi_i^{(+)} \rangle$ a szórási mátrixelemnek azt a járulékat szolgáltatja, amely a H_{PP} Hamilton-operátorban szereplő kölcsönhatási tagtól származik és a potenciál-szórást írja le.

A későbbiek során szükségünk lesz az itt bemutatott eljárás általánosítására, ezért a P és Q operátorok helyett vezessük be a P_i projekciós operátorokat a

$$P_i P_j = \delta_{ij} P_j, \quad \sum_{i=1}^N P_i = 1, \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (\text{IV. 12})$$

definíciókkal. Egyelőre nem specifikáljuk azokat az altereket, amelyekre a P_i operátorok vetítenek. Ezt elég lesz megtenni a konkrét alkalmazásnál. Bevezetve a $P_i |\Psi\rangle = |\Psi_i\rangle$ és $P_i H P_j = H_{ij}$ jelöléseket, a Schrödinger-egyenletből kiindulva a hullámfüggvény $|\Psi_i\rangle$ ortogonális összetevőire a

$$\sum_{j=1}^N [E \delta_{ij} - H_{ij}] |\Psi_j\rangle = 0; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{IV. 13})$$

csatolt egyenletrendszeret kapjuk.

Az egyenletrendszer α -ik egyenletét felhasználva fejezzük ki a hullámfüggvény α -ik komponensét:

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{j \neq \alpha}^N \frac{1}{E - H_{\alpha\alpha}} H_{\alpha j} |\Psi_j\rangle. \quad (\text{IV. 14})$$

Ezt felhasználva a többi $N-1$ egyenletből kieszöböljük ki a $|\Psi_\alpha\rangle$ komponenset:

$$\sum_j (E \delta_{ij} - H_{ij}) |\Psi_j\rangle = \sum_j H_{i\alpha} \frac{1}{E - H_{\alpha\alpha}} H_{\alpha j} |\Psi_j\rangle, \quad i, j \neq \alpha. \quad (\text{IV. 15})$$

Bevezetve a

$$H_{ij}^{(z)}(E) = H_{ij} + H_{i\alpha} \frac{1}{E - H_{\alpha\alpha}} H_{\alpha j} \quad (\text{IV. 16})$$

jelölést a (IV. 15) alatti egyenlet a

$$\sum_j [E\delta_{ij} - H_{ij}^{(z)}(E)] |\Psi_j\rangle = 0; \quad i, j \neq \alpha, \quad (\text{IV. 17})$$

alakot ölti.

Ezt a kiküszöbölési eljárást, amit az algebrában Gauss-féle eliminációnak hívnak, tetszőleges sorrendben ismételhetjük, de természetesen nem többször, mint $N-1$. Minden komponens kiküszöbölésekor eggyel csökken az egyenletrendszer egyenleteinek a száma, de egyre bonyolultabbak lesznek a megmaradó egyenletekben fellépő operátorok. Ha kiküszöböljük a hullámfüggvénynek k komponensét az $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)$ indexek sorrendjének megfelelő sorrendben, akkor a fennmaradó $N-k$ komponensre az

$$\sum [E\delta_{ij} - H_{ij}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k)}(E)] |\Psi_j\rangle = 0; \quad i, j \neq \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k, \quad (\text{IV. 18})$$

egyenletrendszert nyerjük, ahol a fellépő operátor a következő rekurziós relációnak tesz eleget:

$$H_{ij}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k)} = H_{ij}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{k-1})} + H_{i\alpha_k}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{k-1})} \frac{1}{E - H_{\alpha_k \alpha_k}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{k-1})}} H_{\alpha_k j}^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{k-1})}. \quad (\text{IV. 19})$$

A most ismertetett eljárásnak a láttán, azonnal felmerül a kérdés: van-e értelme egy olyan játéknak, amelynek során a hullámfüggvényt komponensekre bontjuk csak azért, hogy azután az egyes komponenseket kiküszöbölhessük és a végén olyan egyenletrendszerhez jussunk, amelyben beláthatatlanul bonyolult energiafüggő, nem-hermitikus operátorok szerepelnek?

A válasz erre egyértelmű *nem*, ha a feladatot exaktul akarjuk megoldani. Ha azonban lemondunk a matematikai exaktságról a fizika javára, akkor ez az eljárás határozott előnyökkel járhat. Ez az eljárás ugyanis, rugalmas manőverezési lehetőségeket szolgáltat az ortogonális alterek definiálására, azok kiküszöbölési sorrendjére, valamint a kiküszöbölés után nyert operátorokra vonatkozó fizikai feltevések megfogalmazására, amint azt a következőkben majd látni fogjuk.

V. Rezonanciák a rugalmas neutron szóráásban

Amint az közismert, a magfizikai rezonancia-jelenséget először neutronokkal kiváltott reakciók hatáskeresztmetszetében észlelték. A nehéz és közepes magok tartományában a jól elkülönülő rezonanciák a 10^{-1} – 10^3 eV-os energiatartományban jelentkeznek, nagyságrendben 10^{-2} – 10^3 eV szélességgel. Ezzel szemben a könnyű magok tartományában a rezonanciák távolsága MeV-es, szélességük pedig 10–100 keV nagyságrendű. A rezonanciák távolságának és szélességének ilyen nagymértékű változását a következő módon lehet értelmezni. Egy nukleon beépülésekor a közbenső mag igen magasan gerjesztett állapotba kerül. A beérkező nukleon kinetikus energiájának változtatásával a gerjesztési energia folytonosan változtatható. Ha a közbenső magnak létezik olyan gerjesztett konfigurációja, amelyben minden nukleon kötött

egyrészesre állapotban van és amely konfigurációhoz éppen akkora energia tartozik, mint a rendelkezésre álló gerjesztési energia, akkor ez a kötött konfigurációnak megfelelő állapot általában elég nagy valószínűséggel kialakul, majd pedig elbomlik. Ez a folyamat a hatáskeresztmetszetben rezonanciaként észlelhető. A tömegszám növekedtével az egyrészesre állapotok sűrűsége növekszik, másrészt a rendelkezésre álló állapotok között a sok nukleon egyre több különböző módon tud eloszlni, így a lehetséges kötött konfigurációknak megfelelő compound magállapotok száma igen rohamosan nő: a tömegszám növekedtével a rezonanciák sűrűsége is nő. Könnyű magok esetén a rezonanciának megfelelő állapotokban kevés nukleon oszlik el a kevés egyrészesre állapot között, ezért a rezonanciaállapotok sűrűsége kicsi.

A közepes és nehéz magoknál, ahol a nívósűrűség nagy, az egyes állapotok általában igen bonyolultak, azaz konfigurációjuk nagyon különbözik a „targetmag alapállapot + bombázó nukleon” konfigurációtól, ezért kis valószínűséggel bomlanak, következésképp kicsi lesz a rezonanciaszélesség is. Ezzel szemben a könnyű magok esetén a kevés nukleon a rendelkezésre álló kevés egyrészesre állapot között nem is tud túl bonyolultan eloszlni, a gerjesztett konfiguráció szükségképpen egyszerű, tehát a bomlás nagy valószínűségű, más szóval a rezonanciaszélesség nagy.

Ebből az érvelésből következik, hogy a könnyű magok esetén remélhető első sorban az, hogy a rezonanciaállapotok mikrostruktúráját fel lehessen deríteni és a rezonancia-jelenség létrejöttének körülményeit számítással nyomon lehessen követni [29]. Nehéz magok esetén, ritka kivételektől eltekintve, ez egyelőre reménytelennek látszik.

A rezonancia-jelenség „mikroszkópikus” tanulmányozására az egyik legkedvezőbb folyamatnak a ^{12}C atommagon végbemenő rugalmas neutronsórás látszik [30]. A kvantitatív elemzés szempontjából kedvező körülmények közül a legfontosabbak a következők:

1. Neutronsórásnál a Coulomb-kölcsönhatás zavaró hatása nem jelentkezik.
2. Alacsony bombázó energián egyedül a rugalmas csatorna nyitott (a befogás teljesen elhanyagolható valószínűségű); ezért a különböző reakciócsatornák egymáshatása nem bonyolítja a helyzetet.
3. A ^{12}C atommag nem túl bonyolult szerkezetű.
4. A folyamatot kísérletileg igen gondosan tanulmányozták és a kísérletileg meghatározott rugalmas szórási hatáskeresztmetszet igen szép rezonanciákat mutat, amelyek eléggé különválnak egymástól, de még sem teljesen izoláltak [31].

Ahhoz, hogy az előző szakaszban ismertetett magreakció elméletet alkalmazhassuk, a konkrét feltételeknek megfelelő konkrét fizikai feltevéseket kell megfogalmaznunk. Ha a feladatot exaktul akarnánk megoldani, akkor először is definiálnunk kellene a H Hamilton operátort, de ennél célszerűbb, ha közvetlenül az általános elméletben előforduló H_{PP} , H_{PQ} , H_{QP} , illetve H_{QQ} operátorokra vezetünk be olyan ésszerű feltevéseket, amelyek a valóságos helyzetnek még tartalmazzák a leglényesebb vonásait, de elég egyszerűek ahhoz, hogy a szokásos matematikai eszközökkel még kezelhetőek legyenek.

I. A P operátor definíciójánál fogva a H_{PP} Hamilton-operátornak csak olyan sajátfüggvényei lehetnek, amelyek aszimptotikusan beeső síkhullámot, kifutó gömbhullámokat és *alapállapotban* levő targetmagot írnak le. Éppen ezért indokolt H_{PP} -t az optikai modell Hamilton-operátorával helyettesíteni. Minthogy kizárólag a rugal-

mas szórás iránt érdeklődünk, azaz az E energiával a rugalmatlan küszöb alatt maradunk, a radiációs befogástól pedig nyugodtan eltekinthetünk, azért az optikai potenciál nem tartalmaz imaginárius részt:

$$H_{PP} \rightarrow H^{\text{opt}} = H_0 + V_c f(r) + V_{s0} \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} (\vec{L} \vec{\sigma}) \quad (\text{V. 1})$$

Az $f(r)$ alakfaktort a Saxon—Woods-féle kifejezéssel azonosítjuk:

$$f(r) = \frac{1}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad a = 0,65 \text{ fm}, \quad R = 1,25 A^{1/3} \text{ fm}. \quad (\text{V. 2})$$

A centrális és a spin-pálya kölcsönhatás erősségére jellemző V_c és V_{s0} paraméterek meghatározásáról a későbbiek során lesz szó.

II. A Q operátor definíciójánál fogva a H_{QQ} operátor két lényeges tulajdonság tekintetében különbözik az eredeti H Hamilton-operátortól:

1. Míg H -nak a spektruma pozitív E energia sajátértékek esetén mindvégig folytonos, addig H_{QQ} -nak a spektruma az első rugalmatlan küszöbig ($E < \varepsilon_1$) diszkrét és csak e küszöb felett válik folytonossá.
2. Míg H állapottere tartalmazza az $(A+1)$ nukleonból álló rendszer összes lehetséges állapotát, addig H_{QQ} állapotteréből ki kell rekeszteni a rugalmas csatornának megfelelő állapotokat.

Minthogy bennünket a továbbiakban csak a rugalmas szórás esete érdekel, és ilyen energiaszinten H_{QQ} spektruma még diszkrét, ezért kézenfekvő H_{QQ} -t az $A+1$ nukleonból álló rendszer „héjmodell” Hamilton-operátorával helyettesíteni:

$$H_{QQ} \rightarrow H^{\text{hm}} = \sum_{i=1}^{A+1} (T_i + V(x_i)) + \sum_{i < k}^{A+1} V(x_i, x_k) \quad (\text{V. 3})$$

ahol $V(x_i)$ egy megfelelően választott, spin-pálya kölcsönhatást is tartalmazó, egy-részecske potenciál, $V(x_i, x_k)$ pedig a „maradék kölcsönhatást” megszemélyesítő kétrészecske-operátor. A H_{QQ} operátor sajátértékeit E_n -nel, a 2. alatti követelményeknek is elegendő sajátfüggvényeit $|\Phi_n\rangle$ -nel fogjuk jelölni, azaz

$$[E_n - H_{QQ}]|\Phi_n\rangle = 0 \quad (\text{V. 4})$$

III. A P és Q operátorok definíciójából következik, hogy a H_{PQ} és H_{QP} operátorok képesek kapcsolatot létesíteni az $P|\Psi\rangle$ és $Q|\Psi\rangle$ ortogonális alterek között. Elég természetesnek látszik feltételezni, hogy a maradékkölcsönhatás az, amely képes előidézni az átmenetet a $P|\Psi\rangle$ és $Q|\Psi\rangle$ altér állapotai között. Ezért a H_{PQ} és H_{QP} operátorokat a maradékkölcsönhatás operátorával azonosítjuk:

$$H_{PQ}, H_{QP} \rightarrow V_R = \sum_{k=1}^A V(x_0, x_k) \quad (\text{V. 5})$$

A továbbiakban a rugalmas szórás T mátrixelemének szerkezetét fogjuk részletesebben elemezni a tett feltevések és a bevezetett közelítések birtokában.

A T -mátrixelem első tagja az energiának lassan változó függvénye, amely a potenciálszórásról, azaz a hatáskeresztmetszetben jelentkező, széles egyrészecske rezonanciákról ad számot. Bizonyos energiaértékeknél, nevezetesen a H_{QQ} saját-

értékei közelében, a T -mátrixelem második tagja hirtelen rezonancia jellegű változást mutat. A kontinuumba ágyazott kötött állapotok kialakulásának és elbomlásának a következtében jelentkező rezonanciáknak az átlagos távolsága és szélessége természetesen jóval kisebb, mint az egyrészeske rezonanciáké.

Kihasználva azt a feltevést, hogy a H_{QQ} diszkrét sajátfüggvényei teljes rendszert alkotnak a $Q|\Psi\rangle$ altérben és ugyanígy a H_{PP} sajátfüggvényei a $P|\Psi\rangle$ altérben, a T -mátrixelemeit a következő alakba írhatjuk:

$$\mathcal{T}_{fi} = \mathcal{T}_{fi}^{\text{opt}} + \mathcal{T}_{fi}^{\text{res}} \quad (\text{V. 6})$$

ahol

$$\mathcal{T}_{fi}^{\text{opt}} = \langle \eta_{fE} | H^{\text{opt}} - H_0 | \chi_{iE}^{(+)} \rangle,$$

$$\mathcal{T}_{fi}^{\text{res}} = \sum_{mn} \langle \chi_{fE}^{(-)} | V_R | \Phi_n \rangle \cdot \langle n | A^{-1} | m \rangle \langle \Phi_m | V_R | \chi_{iE}^{(+)} \rangle,$$

$$\langle m | A | n \rangle = \langle \Phi_m | E - H^{\text{hm}} - V_R \frac{1}{E - H_{+ie}^{\text{opt}}} V_R | \Phi_n \rangle =$$

$$= (E - E_n) \delta_{mn} - \sum_c \int \langle \Phi_m | V_R | c, r_0 \rangle g_{cE}^{(+)}(r_0, r'_0) \langle c, r'_0 | V_R | \Phi_n \rangle \cdot r_0 r'_0 dr_0 dr'_0$$

Itt a $\langle \Phi_m | V_R | c, r_0 \rangle$ alakfaktor annyiban különbözik a $\langle \Phi_m | V_R | \chi_{cE}^{(+)} \rangle$ mátrixelemtől, hogy nem tartalmazza a szóródást szenvedő nukleon radiális hullámfüggvényét és az r_0 radiális koordinátára nincs integrálva, következésképp r_0 -nak a függvénye. A kifizető hullámoknak megfelelő $g_{cE}^{(+)}(r_0, r'_0)$ radiális Green-függvény a következő alakban adható meg [32]:

$$g_{cE}^{(+)}(r_0, r'_0) =$$

$$= -\pi [v_{cE}(r_0) w_{cE}(r'_0) \Theta(r_0 r'_0) + v_{cE}(r'_0) w_{cE}(r_0) (1 - \Theta(r_0 r'_0)) + i v_{cE}(r_0) v_{cE}(r'_0)], \quad (\text{V. 7})$$

ahol $v_{cE}(r_0)$ és $w_{cE}(r_0)$ az optikai potenciált tartalmazó egyrészeske Schrödinger-egyenletnek a reguláris és irreguláris megoldása a szokásos aszimptotikával és normálással:

$$v_{cE}(r_0) \rightarrow \sqrt{\frac{k}{\pi E}} \sin \left(k r_0 - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right),$$

$$w_{cE}(r_0) \rightarrow \sqrt{\frac{k}{\pi E}} \cos \left(k r_0 - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right), \quad r_0 \rightarrow \infty. \quad (\text{V. 8})$$

A $\Theta(r_0 r'_0)$ ugrásfüggvény értéke 1, ha $r_0 < r'_0$ egyébként zérus. Megjegyzendő, hogy a Green-függvénynek ez az alakja csak akkor helyes, ha eltekintünk a bombázó nukleonnak a targetmagbéli nukleonokkal való azonosságától, azaz az antiszimmetrizálástól.

Ezek alapján az A mátrixelem a jólismert Breit—Wigner nevező alakját ölti:

$$\langle m | A | n \rangle = (E - E_n) \delta_{mn} - \Delta_{mn}(E) - \frac{i}{2} \Gamma_{mn}(E) \quad (\text{V. 9})$$

ahol a Δ nivóeltolódást és a Γ nivószélességet a

$$\Delta_{mn}(E) = -\pi \sum_c \int \langle \Phi_m | V_R | c, r_0 \rangle [v_{cE}(r_0) w_{cE}(r'_0) \Theta(r_0 r'_0) + v_{cE}(r'_0) w_{cE}(r_0) (1 - \Theta(r_0 r'_0))] \cdot \langle c, r'_0 | V_R | \Phi_n \rangle r_0 r'_0 dr'_0, \quad (\text{V. 10})$$

$$\Gamma_{mn}(E) = 2\pi \sum_c \int \langle \Phi_m | V_R | c, r_0 \rangle \cdot v_{cE}(r_0) v_{cE}(r'_0) \langle c, r'_0 | V_R | \Phi_n \rangle r_0 r'_0 dr_0 dr'_0. \quad (\text{V. 11})$$

egyenletek definiálják. Bevezetve az

$$(\Gamma_m^c)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \langle \Phi_m | V_R | c, r_0 \rangle v_{cE}(r_0) r_0 dr_0 \quad (\text{V. 11})$$

jelölést, a T -mátrixelem a következő alakba írható:

$$\mathcal{T}_{fi} = \mathcal{T}_{fi}^{\text{opt}} + \frac{1}{2\pi} \sum_{mn} e^{i\delta_f} (\Gamma_m^f)^{1/2} \left[\frac{1}{E - E_n - \Delta + \frac{i}{2} \Gamma} \right]_{mn} (\Gamma_n^i)^{1/2} e^{i\delta_i} \quad (\text{V. 12})$$

Itt kihasználtuk azt a tényt, hogy a $|\chi_{cE}^{(+)}\rangle$ hullámfüggvényben szereplő, „beeső síkhullám + kifutó hullámok” aszimptotikának eleget tevő $u_{cE}^{(+)}(r_0)$ hullámfüggvény a $v_{cE}(r_0)$ reguláris megoldás segítségével az $u_{cE}^{(+)}(r_0) = e^{i\delta_c} v_{cE}(r_0)$ alakban fejezhető ki, ahol δ_c az optikai potenciál következtében létrejövő fáziseltolódás.

Ezek után az a feladat, hogy a $^{12}\text{C} + n$ rendszer esetére konkrétan meghatározzuk a $|\Phi_n\rangle$, a $v_{cE}(r_0)$ és $w_{cE}(r_0)$ hullámfüggvényeket. Ezen feladat megoldása során célszerűnek látszik a Barker [33] által is követett utat választani, alapul véve a Lane féle modellt [34], amely a ^{13}C mag alacsonyán gerjesztett páros paritású állapotainak leírására ad egy elég realiztikusnak tűnő és egyben igen könnyen kezelhető módszert.

A Lane-féle modell szerint a ^{13}C páros paritású állapotai első közelítésben úgy jönnek létre, hogy a ^{12}C alapállapotához, illetve a 4,433 MeV-nél fekvő 2^+ spinű és paritású állapotához csatolódik a $2s - 1d$ héjban helyet foglaló utolsó neutron. Második közelítésként figyelembe vehetjük az utolsó neutronnak az alap, illetve gerjesztett állapotban levő törzs nukleonjaival való individuális kölcsönhatását.

Ennek az egyszerű modellnek többek között az az előnyös tulajdonsága, hogy a $Q|\Psi\rangle$ altér bázisfüggvényeinek megkonstruálása teljesen egyszerűen történhet. Nem kell mást tenni, mint a gerjesztett állapothoz tartozó hullámfüggvényt vektorcsatolni az $1d_{5/2}$, $1d_{3/2}$ és a $2s_{1/2}$ egyrézecske-függvényekkel, majd ezt követően elvégezni az antiszimmetrizálást. A ^{12}C alap- és első gerjesztett állapotának leírására az egyszerűség kedvéért az $(1s)^4(1p)^8$ konfiguráció [444] particióval jellemzett ($S=0$, $T=0$) $L=0$, illetve $L=2$ impulzusmomentumhoz tartozó függvényeit használtuk. A radiális hullámfüggvényeket a megfelelő oszcillátor sajátfüggvényekkel közelítettük. Az utolsó neutron hullámfüggvényeit ezen két függvényhez csatolva és antiszimmetrizálva a $|\Phi(J_0 j J)\rangle$ bázisrendszer nyerjük, ahol a $(J_0 j J)$ szimbólumban $J_0 (=0, 2)$ a ^{12}C , $j (=1/2, 3/2, 5/2)$ az utolsó neutron, J pedig a ^{13}C teljes impulzusmomentumát jelenti. A $J_0=0$, $j=J$, azaz a $|\Phi(0J|J)\rangle$ típusú elemek elhagyásával éppen a $Q|\Psi\rangle$ altér bázisrendszerét nyerjük. Ezzel a feladat megoldásának útját egyértelműen kijelöltük, a további lépéseket, amelyek többnyire számítástechnikai, illetve programozástechnikai jellegűek, csak vázlatosan ismertetjük.

Először is felhasználva a teljes $\Phi(J_0j|J)$ bázisrendszert, numerikus eljárással diagonalizáljuk a H^{hm} Hamilton-operátor mátrixát és az előforduló szabad paramétereket úgy választjuk meg, hogy az eredmények optimális egyezésben legyenek a ^{13}C kötött állapotainak kísérletileg mért adataival. Ezután a bázisrendszerből elhagyva a $|\Phi(0J|J)\rangle$ típusú elemeket és újra elvégezve a diagonalizálást, most már szabad paraméterek nélkül, nyerjük a H_{QQ} Hamilton-operátor $|\Phi_n\rangle$ sajátfüggvényeit és sajátértékeit.

Az optikai potenciál centrális részének erősségét megszabó V_c paraméter meghatározására felhasználtuk azt a körülményt, hogy a teljes $|\Phi(J_0j|J)\rangle$ bázisrendszerben végrehajtott diagonalizálás eredményeképpen kapott legmélyebb energiájú, $1/2$ spin sajátállapot gyakorlatilag $2s_{1/2}$ jellegű egyrészecske állapot. Pontosabban fogalmazva ez az állapot 0,98 valószínűséggel tartalmazza a „ ^{13}C alapállapot + $2s_{1/2}$ egyrészecske állapotban levő neutron” konfigurációt. Ennek alapján a valós optikai potenciál centrális részében szereplő V_c paramétert úgy választottuk meg, hogy a $2s_{1/2}$ állapot energiája $-1,86$ MeV legyen, ami megfelel a ^{13}C -ban megfigyelt $1/2^+$ spinű és paritású kötött állapot energiájának.

Ezek után szabad paraméternek egyedül a spin-pálya kölcsönhatás V_{s0} erőssége maradt. Ezt az egy paramétert szabadon variáltuk, és végül abból a követelményből kiindulva rögzítettük, hogy a $j=3/2$ és $l=2$ kvantumszámokkal jellemzett, erősen egyrészecske jellegű rezonancia a kísérletileg megállapított 3,25 MeV-nél jelentkezék. Ily módon a V_c és V_{s0} potenciál erősségekre a $V_c = -57,6$ MeV és a $V_{s0} = 7,4$ MeV értékek adódtak, amelyek összhangban vannak az irodalomban fellelhető adatokkal. A vázolt eljárást követve a $0,1 \leq E \leq 4,5$ MeV intervallumban kiszámítottuk a $\mathcal{T}_{fi}(E)$ szórási amplitúdót, majd pedig a rugalmas szórás $\sigma(E)$ integrális hatáskeresztmetszetét, felhasználva a

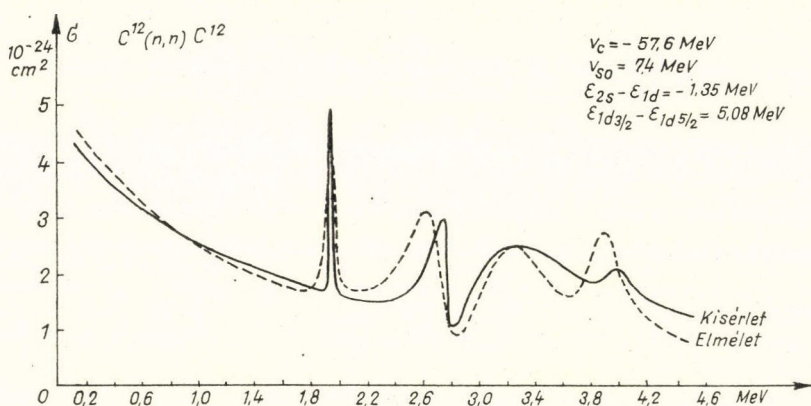
$$\sigma(E) = \frac{4\pi^3}{k^2} \sum_J \frac{2J+1}{2(2S+1)} \sum_{fi} |\mathcal{T}_{fi}^{(J)}(E)|^2 \quad (\text{V. 13})$$

összefüggést, ahol J a közbenső rendszer, s pedig a targetmag teljes impulzusmomentuma. A számítás eredményeit a kísérleti adatokkal összehasonlítva, különös tekintettel a rezonanciák helyére és szélességére, a rezonanciákhoz tartozó spin- és paritásértékekre, a hatáskeresztmetszet abszolút értékére, valamint a hatáskeresztmetszetnek a kis energiáknál mutatott viselkedésére, meglepő jó egyezést tapasztalunk. A számított és kísérletileg mért hatáskeresztmetszeteket az 1. ábrán hasonlítottuk össze. Amint látható, a kísérlet és az elmélet közötti összhang egészen kitűnő, annak ellenére, hogy az elméleti leírásba meglehetősen heterogén, részben a héjmodellből, részben az optikai modellből származó információkat ötvöztünk össze.

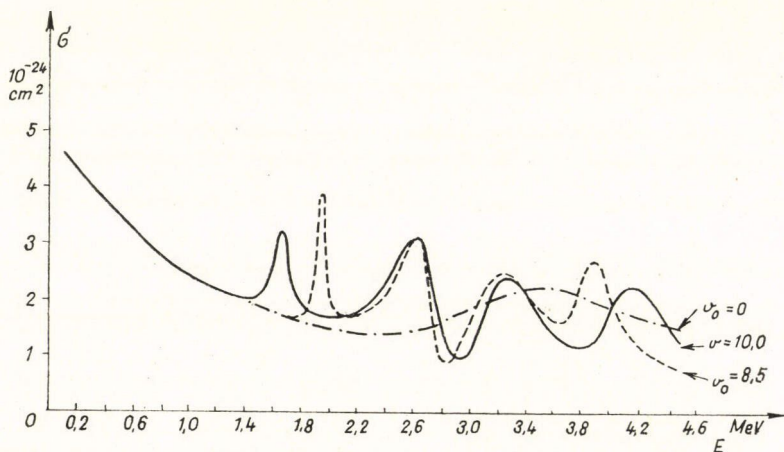
Az (V. 6) formulából világosan látszik, hogy az $\langle m|A^{-1}|n\rangle$ inverz mátrix révén valamennyi rezonancia csatolva van valamennyi rezonanciával. Ez a csatolás az $\langle m|A|n\rangle$ mátrix nem diagonális elemeinek nagyságától függően lehet erős is és gyenge is. Részletesen megvizsgálva a körülményeket kiderül [30], hogy a jelen esetben a csatolás erős, mégpedig azért, mert a 3,25 MeV-nél jelentkező rezonancia erősen egyrészecske jellegű, más szóval ez a rezonancia nem egy kontinuumba ágyazott kötött állapothoz tartozik, hanem az optikai potenciálban létrejövő potenciál szórási rezonancia, ez pedig egyrészt érezteti a hatását a környéken levő összes többi rezonanciára, másrészt közvetíti a többi rezonancia egymásrahatását. Itt tehát olyan helyzettel állunk szemben, amikor különböző jellegű, egyrészecske, illetve sok-

részecske jellegű rezonanciák hatnak egymásra mégpedig nem az egyszerű interferencia révén, hanem dinamikusán. Részletesebben megfogalmazva: a $^{12}\text{C} + n$ rendszerben olyan állapot képes kialakulni, amely bizonyos amplitúdókkal tartalmazza a különböző kontinuumba ágyazott kötött állapotokat és ezeknek az amplitúdóknak a nagysága rezonanciaszerűen változik a potenciálszórásban létrejövő egyrészecske rezonancia környékén. A rezonanciák egymáshatásának a tanulmányozása céljából módszeresen változtattuk a V_R maradék kölcsönhatás v_0 erősségét és a kapott hatáskeresztmetszeteket a 2. ábrán hasonlítottuk össze.

Kvalitatíve teljesen világos, hogy ha a maradék kölcsönhatás, amely az átmenetet létrehozza a $|\Phi_n\rangle$ „compound” állapotok és a $|\chi_{ce}^{(\pm)}\rangle$ szórási állapotok között, gyenge, akkor a szórási folyamatot alapvetően az átlagpotenciál determinálja, következésképp a hatáskeresztmetszetben az egyrészecske rezonanciák dominálnak.



1. ábra. A rugalmas neutronszórás hatáskeresztmetszete a ^{12}C atommagon



2. ábra. A rugalmas neutronszórás hatáskeresztmetszetének a maradék kölcsönhatás v_0 erősségétől való függése

Másrészt viszont, ha a maradék kölcsönhatás nagyon erős, akkor az átlagpotenciál által megszabott egyrézecske állapotok teljesen szétroncsolódnak és a hatáskeresztmetszet fölött a compound rezonanciák veszik át az uralmat [35].

Az ábráról valóban leolvasható, hogy a maradék kölcsönhatás növelésével az összes, sokrézecskes rezonancia szélessége nő, és egyedül az egyrézecske rezonancia szélessége csökken.

VI. Izobár analóg rezonanciák

Már több évtizeddel ezelőtt felfedezték, hogy a szomszédos könnyű magok gerjesztési spektruma erősen hasonlít egymásra. Ezt a hasonlatosságot a magerők töltésfüggetlenségének az elve alapján lehet értelmezni. Az azonos tömegszámú magok, azaz az izobárok energia-sajátállapotait az izospinnek meghatározott sajátértékével jellemzett töltés multiplettekbe lehet szervezni. Ha a töltésfüggő kölcsönhatásokat teljesen elhanyagoljuk, akkor az izospin jó kvantumszám lesz, a töltés multiplett elemei pedig teljesen degeneráltak. A szomszédos izobárok energia-sajátállapotai között az izospin vetületet növelő, illetve csökkentő operátorok létesítenek kapcsolatot:

$$T_{\pm} |\Phi_{\alpha}^{TM_T}\rangle = \sqrt{T(T+1) - M_T(M_T \pm 1)} |\Phi_{\alpha}^{TM_T \pm 1}\rangle \quad (\text{VI. 1})$$

Egy adott töltésmultiplett elemeit, azaz adott α és T kvantumszámokhoz tartozó, M_T -ben különböző állapotokat izobár analóg állapotoknak nevezzük. A töltésfüggő kölcsönhatások a különböző izospinű állapotok keveredését idézik elő (az izospin megszűnik exakt kvantumszám lenni); másrészt felhasítják a degenerációt; az analóg állapotok energiái egymáshoz képest eltolódnak. A könnyű magok tartományában ez a keveredés, illetve felhasadás nem túl nagy, amint azonban az egyre nehezebb magok felé haladunk az analóg állapotoknak az eltolódása egymáshoz képest, az ún. ΔE_c Coulomb eltolódás, egyre inkább növekszik és bekövetkezik az a helyzet, hogy az alacsonyan fekvő állapotoknak megfelelő analóg állapotok a nagyobb töltésű szomszédos izobárnál már a folytonos energiatartományba esnek.

Évtizedeken keresztül az a hiedelem uralkodott, hogy a nehéz magok felé haladva az izospin egyre kevésbé lesz jó kvantumszám és a Ca után a töltésfüggő kölcsönhatások intenzitása oly naggyá válik, hogy az izospin értelmét veszti. Ez a feltevés az utolsó évtizedben gyökeresen megváltozott. 1961-ben *Anderson és Wong* [36] felfedezte, hogy a direkt jellegű (p, n) reakcióból származó neutronok spektrumában nagy intenzitású, éles csúcsok jelentkeznek, azaz a termékmag nagy valószínűséggel marad vissza bizonyos jól definiált állapotokban. Csakhamar kiderült, hogy ezen energiaértékek és a targetmag alacsonyan fekvő állapotainak energiái között a különbség éppen ΔE_c , tehát analóg állapotokról van szó, mégpedig a középnehéz magok tartományában, ahol senki nem várta a töltés multiplett szerkezetnek még a nyomát sem. Három évvel később *Fox, Moore és Robson* [37] a rugalmas protonszórás hatáskeresztmetszetében fedezett fel éles rezonanciákat, amelyeknek egymástól mért távolsága, spinje és paritása tökéletesen egyezett a targetmag + neutron rendszer alacsonyan fekvő állapotainak megfelelő adataival. Ilyen rezonanciákat, amelyeket izobár analóg rezonanciáknak nevezünk, tömegesen figyeltek meg az utóbbi években [38]. A megdöbbentő és váratlan ebben a jelenségben az, hogy abban

az energiatartományban, ahol az izobár analóg rezonanciák jelentkeznek, a nívó-sűrűség általában igen nagy, rezonanciák százával, sőt tízezer számra fordulnak elő; ezek egymást sokszorosán átfedve egy teljesen szerkezet nélküli kontinuumot alkotnak, és az izobár analóg rezonanciák ebből a kontinumból képesek kiemelkedni. Az izobár analóg rezonanciák létrejöttét, illetve megfigyelhetőségét csak az izospin nagyfokú tisztaságával lehet értelmezni. Az analóg állapotnak az izospinje különbözik az öt, száz, illetve ezerszámban körülvevő állapotok izospinjétől. A különböző izospinű állapotok közötti keveredés nagyon kismértékű, ezért az izobár analóg állapot nem oldódik fel a többi állapotok tengerében. Amint az a részletes elemzések-ből kiderült, a korábbi hiedelemmel ellentétben az izospin kvantumszám jósága nem csak a töltésfüggő kölcsönhatások intenzitásától függ, hanem a neutronfölösleg értékétől is. A neutronfölösleg növekedtével az izospin tisztaság is növekszik [39]. Ez a magyarázata annak, hogy az izospin az egész periódusos rendszer mentén jogosan használható, mint az állapotokat jellemző kvantumszám.

Az előző fejezetben tett megjegyzés alapján azt várnánk, hogy a nehéz magok tartományában a rezonanciák, illetve a rezonanciákhoz tartozó kvázikötött állapotok mikroszerkezetének kvantitatív elemzése a nagyfokú bonyolultság miatt reménytelen. Ez általában valóban így is van, a manapság ismert egyetlen kivétel az izobár analóg rezonanciák esete. Ezeket a rezonanciákat elsősorban az különbözteti meg a többi compound rezonanciáktól, hogy a hozzájuk tartozó kvázikötött állapotok feltűnően egyszerű szerkezetűek, nevezetesen éppen olyan egyszerűek, mint a szomszédos izobár (a targetmag + neutron) alacsonyban fekvő állapotai. Ezért van remény arra, hogy ezen kvázikötött állapotok mikroszerkezete felderíthető.

A másik kedvező körülmény abban áll, hogy az állapotok jellemzésére használhatjuk az izospin kvantumszámot.

A továbbiakban a részletes elemzés kiinduló pontját a Feshbach-féle reakció elmélet fogja szolgáltatni.

Amint az előző fejezetben már láttuk, döntő fontossága van a projekciós operátorok megválasztásának és a projiciált operátorokra tett fizikai feltevéseknek.

Az izobár analóg rezonanciák tárgyalására célszerű 4 ortogonális alteret definiálni:

A P_1 projekciós operátor legyen azonos az eredetileg bevezetett P operátorral, amely a „targetmag alapállapot + bombázó proton” konfigurációt választja ki. P_2 a $T_> \left(= \frac{N-Z+2}{2} \right)$, P_3 pedig a $T_< \left(= \frac{N-Z-2}{2} \right)$ izospin kvantumszámokkal jellemzett kötött konfigurációknak megfelelő alteret vetíti ki. P_4 legyen a $P_1 + P_2 + P_3$ -at egység operátorra kiegészítő operátor, amely a hullámfüggvénynek azokat a komponenseit választja ki, amelyek megfelelnek a rugalmatlan folyamatoknak.

Az alterek kiküszöbölését a (2, 3, 4) sorrendben hajtjuk végre. Így $|\Psi_1\rangle$ -re az

$$[E - H_{11}^{(2,3,4)}(E)]|\Psi_1\rangle = 0 \quad (\text{VI. 2})$$

egyenletet nyerjük, ahol

$$\begin{aligned} H_{11}^{(2,3,4)}(E) = & H_{11} + H_{12} \frac{1}{E - H_{22}} H_{21} + H_{13}^{(2)}(E) \frac{1}{E - H_{33}^{(2)}(E)} H_{31}^{(2)}(E) + \\ & + H_{14}^{(2,3)}(E) \frac{1}{E - H_{44}^{(2,3)}(E)} H_{41}^{(2,3)}(E). \end{aligned} \quad (\text{VI. 3})$$

Bevezetve a

$$|\Psi_P\rangle = |\Psi_1\rangle,$$

$$\mathcal{H}_{PP} = H_{11} + H_{13}^{(2)} \frac{1}{E - H_{33}^{(2)}} H_{31}^{(2)} + H_{14}^{(2,3)} \frac{1}{E - H_{44}^{(2,3)}} H_{41}^{(2,3)}, \quad (\text{VI. 4})$$

$$\mathcal{H}_{PQ} = H_{12}, \quad \mathcal{H}_{QP} = H_{21}, \quad \mathcal{H}_{QQ} = H_{22}$$

jelöléseket formailag a (IV. 8) alatti egyenlettel azonos

$$[E - \mathcal{H}_{PP}]|\Psi_P\rangle = \mathcal{H}_{PQ} \frac{1}{E - \mathcal{H}_{QQ}} \mathcal{H}_{QP} |\Psi_P\rangle \quad (\text{VI. 5})$$

egyenletet kapjuk.

Az előző szakaszban ismertetett eljáráshoz hasonlóan definiáljuk a $|\chi^{(\pm)}\rangle$ és $|\Psi_n\rangle$ hullámfüggvényeket, mint az

$$[E - \mathcal{H}_{PP}]|\chi^{(\pm)}\rangle = 0 \quad (\text{VI. 6})$$

illetve

$$[E_n - \mathcal{H}_{QQ}]|\Phi_n\rangle = 0 \quad (\text{VI. 7})$$

egyenletek megoldásait, valamint a \mathcal{H}_{PP} operátor

$$G^{(+)}(E) = (E - \mathcal{H}_{PP} + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{VI. 8})$$

Green-függvényét.

Ezen mennyiségek segítségével a rugalmas szórás T -mátrixeleme a következőképpen fejezhető ki:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^P + \mathcal{T}^Q \quad (\text{VI. 9})$$

ahol

$$\mathcal{T}^Q = \sum_{nm} \langle \chi^{(-)} | \mathcal{H}_{PQ} | \Phi_m \rangle \langle m | A^{-1} | n \rangle \langle \Phi_n | \mathcal{H}_{QP} | \chi^{(+)} \rangle \quad (\text{VI. 10})$$

és

$$\langle m | A | n \rangle = \langle \Phi_m | E - \mathcal{H}_{QQ} - \mathcal{H}_{QP} G^{(+)}(E) \mathcal{H}_{PQ} | \Phi_n \rangle \quad (\text{VI. 11})$$

A \mathcal{H}_{PP} operátor, amint az a definíciójából leolvasható, egy olyan energiafüggő, nem hermitikus, effektív Hamilton operátor, amely három folyamat hatását foglalja magába. Az első tagja (H_{11}) a potenciálszórásnak, a második tagja $\left(H_{13}^{(2)} \frac{1}{E - H_{33}^{(2)}} H_{31}^{(2)} \right)$ a $T_{<}$ izospinű, kontinuumba ágyazott kötött állapotok virtuális gerjesztésével járó szórásnak, a harmadik tagja $\left(H_{14}^{(2,3)} \frac{1}{E - H_{44}^{(2,3)}} H_{41}^{(2,3)} \right)$

pedig a rugalmatlan csatornák érintésével lezajló rugalmas szórásnak felel meg. Minthogy a vizsgálni kívánt energiatartományban (~ 10 MeV) a normál izospinű kontinuumba ágyazott kötött állapotok sűrűsége és a nyitott rugalmatlan csatornák száma is rendkívül nagy, várható, hogy a \mathcal{H}_{PP} operátorhoz tartozó szórási amplitúdó az energiának igen gyorsan változó, heves fluktuációkat mutató függvénye lesz. Ha lemondunk arról, hogy a $\mathcal{T}^P(E)$ energia függését teljes részletességgel leírjuk, azaz ha megelégszünk $\mathcal{T}^P(E)$ helyett ennek energiaszerinti átlagával, akkor az eredeti \mathcal{H}_{PP} helyett bevezethetjük a fenomenologikus optikai modell H^{opt} Hamilton-operátorát, amely energiafüggő komplex potenciált tartalmaz és úgy van definiálva, hogy a $\mathcal{T}_P(E)$ valódi szórási amplitúdó helyett, annak energiaszerinti képezett $\langle \mathcal{T}^P \rangle$ átlagértékét legyen képes reprodukálni.

Ha a \mathcal{H}_{PP} -t helyettesítjük az optikai modellből vett H^{opt} Hamilton operátorral, akkor természetesen az eredeti teljes $\mathcal{T}(E)$ szórási amplitúdó helyett is annak energiaszerinti $\langle \mathcal{T} \rangle$ átlagát nyerjük:

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \langle \mathcal{T}^P \rangle + \langle \mathcal{T}^Q \rangle. \quad (\text{VI. 12})$$

Az átlagolás eltünteti a heves fluktuációkat a szórási amplitúdó mindkét tagjából. Ennek eredményeképpen $\langle \mathcal{T}^P \rangle$ az energiának lassan változó függvénye lesz ezzel szemben a $\langle \mathcal{T}^Q \rangle$ -ben még megmaradnak azok a rezonanciaszerű változások, amelyet a $T_>$ izospinnel jellemzett kontinuumba ágyazott kötött állapotok idéznek elő.

A $\mathcal{H}_{PP} \rightarrow H^{\text{opt}}$ közelítés bevezetése szükségessé teszi az eddigiekben szereplő mennyiségek megfelelő újra definiálását:

$$\langle \mathcal{T}^P \rangle = \mathcal{T}^{\text{opt}}, \quad \langle \mathcal{T}^Q \rangle = \mathcal{T}^{\text{res}}, \quad (\text{VI. 13})$$

$$\mathcal{T}^{\text{res}} = \sum_{mn} \langle \tilde{\phi}_p^{(-)} | \mathcal{H}_{PQ} | \Phi_m \rangle \langle m | A_{\text{opt}}^{-1} | n \rangle \langle \Phi_n | \mathcal{H}_{QP} | \phi_p^{(+)} \rangle \quad (\text{VI. 14})$$

$$\langle m | A_{\text{opt}} | n \rangle = \langle \Phi_m | E - \mathcal{H}_{QQ} - \mathcal{H}_{QP} G_{\text{opt}}^{(+)}(E) \mathcal{H}_{PQ} | \Phi_n \rangle \quad (\text{VI. 15})$$

$$[E - H^{\text{opt}}] | \phi_p^{(\pm)} \rangle = 0 \quad (\text{VI. 16})$$

$$[E - H^{\text{opt}*}] | \tilde{\phi}_p^{(\pm)} \rangle = 0 \quad (\text{VI. 17})$$

$$G_{\text{opt}}^{(+)}(E) = (E - H^{\text{opt}} + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{VI. 18})$$

Feltétlenül hangsúlyozni kell, hogy az átlagos szórási amplitúdónak az előzőekben részletezett előállítási módja csak akkor értelmes és akkor célszerű ha $T_>$ és $T_<$ állapotok közötti csatolás gyenge, és $T_>$ izospinű állapotok sűrűsége lényegesen kisebb a $T_<$ izospinű állapotokénál. A vizsgált energiatartományban, nevezetesen a Coulomb gát alatt mindkét feltétel teljesedik [39].

Ezek után a következő feladat abban áll, hogy megkeressük az

$$[E_n - \mathcal{H}_{QQ}] | \Phi_n \rangle = 0 \quad (\text{VI. 19})$$

egyenlet megoldásait. Ebből a célból vizsgáljuk meg az eggyel több neutront és eggyel kevesebb protont tartalmazó szomszédos izobár alap és alacsonyban fekvő gerjesztett állapotait, amelyek elegendő tesznek az

$$[\mathcal{E}_m - H] | \Theta_m^{TM_T} \rangle = 0 \quad (\text{VI. 20})$$

egyenletnek és amelyek jó közelítéssel izospin sajátállapotok az

$$M_T = \frac{N+1-(Z-1)}{2} (=T_>) \quad \text{és} \quad T = M_T (=T_>)$$

sajátértékekkel. Kiindulva a $|\Theta_m^{TM_T}\rangle$ állapotokból a T^\pm izospinléptető operátor segítségével generálhatjuk a szomszédos izobár állapotait:

$$\left(\mathcal{E}_m + \frac{[H, T_-] T_+}{2T_>} - H \right) \frac{T_- | \Theta_m^{T_>T_>} \rangle}{\sqrt{2T_>}} = 0, \quad (\text{VI. 21})$$

vagy a szokásos közelítést használva

$$(\mathcal{E}_m + \Delta E_c - H)|\Theta_m^{T_+ T_+ -1}\rangle = 0, \quad (\text{VI. 22})$$

ahol a $[H, T_-]T_+/2T_+$ operátort, azaz a Hamilton-operátornak az izospinnel fel nem cserélhető részét a várható értékével, a ΔE_c Coulomb energiával helyettesítettük.

$$A \quad |\Theta_m^{T_+ T_+ -1}\rangle = \frac{T_- |\Theta_m^{T_+ T_+}\rangle}{\sqrt{2T_+}} \quad (\text{VI. 23})$$

formulával definiált függvény szerkezetét jól szemlélteti a következő szimbolikus képlet:

$$\frac{T_-}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} + \sqrt{\frac{2T_+ - 1}{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} \quad (\text{VI. 20})$$

Itt a bal (jobb) oldali oszlop a betöltött proton (neutron) állapotokat jelképezi, az üres kör lyukat, a teli kör részecskét jelent.

Az első tag a „target alapállapot + proton” konfigurációnak megfelelő komponens. Könnyű belátni, hogy ha ez a komponens nem lenne, akkor $|\Theta_m^{T_+ T_+ -1}\rangle$ -et közvetlenül a $|\Phi_m\rangle$ -mel lehetne azonosítani. De mivel ennek a komponensnek az amplitúdója $(1/\sqrt{2T_+})$ igen kicsi, ha a neutrontöbblet vagy más szóval az izospin nagy, azért első közelítésben mégis csak helyettesíthetjük $|\Phi_m\rangle$ -et $|\Theta_m^{T_+ T_+ -1}\rangle$ -gyel és E_m -et $\mathcal{E}_m + \Delta E_c$ -vel. Feltétlenül meg kell azonban jegyezni, hogy a konkrét modellek keretei között mindig van lehetőség arra, hogy ezt a közelítést javítsuk és a hullámfüggvényből a „targetmag alapállapot + proton” konfigurációnak megfelelő komponenst több-kevesebb pontossággal kiküszöböljük.

Egyelőre azonban a $|\Phi_m\rangle \approx |\Theta_m^{T_+ T_+ -1}\rangle$, $E_m \approx \mathcal{E}_m + \Delta E_c$ közelítést használva, határozzuk meg a szórási amplitúdóban szereplő mennyiségeket:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_m | \mathcal{H}_{QP} | \varphi_p^{(+)} \rangle &\approx \langle \Theta_m^{T_+ T_+} | \frac{T_+}{\sqrt{2T_+}} \mathcal{H}_{QP} | \varphi_p^{(+)} \rangle \approx \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2T_+}} \langle \Theta_m^{T_+ T_+} | \mathcal{H}_{QP} T_+ | \varphi_p^{(+)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2T_+}} \langle \Theta_m^{T_+ T_+} | \mathcal{H}_{QP} | \varphi_n^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{VI. 25})$$

Itt feltételeztük, hogy a T_+ és \mathcal{H}_{QP} felcserélhető, tehát a \mathcal{H}_{QP} -ben a nukleáris kölcsönhatás mellett a töltésfüggő kölcsönhatást elhanyagoltuk.

Kihasználtuk továbbá a

$$T_+ |\varphi_p^{(+)}\rangle = |\varphi_n^{(+)}\rangle \quad (\text{VI. 26})$$

összefüggést, amelynek a tartalma jól látszik, a

$$T_+ \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} \quad (\text{VI. 27})$$

szimbolikus képletből, amely azt fejezi ki, hogy a T_+ „töltésnövelő” operátor a Pauli elv miatt csak az utolsó protont tudja neutronná változtatni, mert a targetben jelenlevő protonok állapotának megfelelő neutron állapotok mind be vannak töltve.

Hasonlóképpen

$$\begin{aligned}
 \langle m | A_{\text{opt}} | n \rangle &\approx \langle \Theta_m^{T>T>} | \frac{T_+}{\sqrt{2T_>}} (E - \mathcal{H}_{QQ} - \mathcal{H}_{QP} G_{\text{opt}}^{(+)} \mathcal{H}_{PQ}) \frac{T_-}{\sqrt{2T_>}} | \Theta_n^{T>T>} \rangle \approx \\
 &\approx (E - \mathcal{E}_m - \Delta E_c) \delta_{mn} - \frac{1}{2T_>} \langle \Theta_m^{T>T>} | \mathcal{H}_{QP} \tilde{G}_{\text{opt}}^{(+)} \mathcal{H}_{PQ} | \Theta_n^{T>T>} \rangle = \\
 &= (E - \mathcal{E}_m - \Delta E_c) \delta_{mn} - A_{mn} + \frac{i}{2} \Gamma_{mn}
 \end{aligned} \tag{VI. 28}$$

ahol

$$A_{mn} = \frac{1}{2T_>} \text{Re} \langle \Theta_m^{T>T>} | \mathcal{H}_{QP} \tilde{G}_{\text{opt}}^{(+)} \mathcal{H}_{PQ} | \Theta_n^{T>T>} \rangle \tag{VI. 29}$$

$$\Gamma_{mn} = -\frac{1}{2T_>} \text{Im} \langle \Theta_m^{T>T>} | \mathcal{H}_{QP} \tilde{G}_{\text{opt}}^{(+)} \mathcal{H}_{PQ} | \Theta_n^{T>T>} \rangle \tag{VI. 30}$$

A

$$\tilde{G}_{\text{opt}}^{(+)} = T_+ G_{\text{opt}}^{(+)} T_-$$

egyenlettel definiált $\tilde{G}_{\text{opt}}^{(+)}$ Green függvény a $G_{\text{opt}}^{(+)}$ függvénytől csak abban különbözik, hogy az utolsó nukleon töltés koordinátájában „proton” helyett „neutron” áll.

A Γ_{mn} szélesség elvben két tagból áll:

$$\Gamma_{mn} = \Gamma_{mn}^{\dagger} + \Gamma_{mn}^{\ddagger} \tag{VI. 31}$$

ahol Γ_{mn}^{\dagger} „megszökési” szélesség, amely a kontinuumhoz való csatolódás mértékét szolgáltatja, Γ_{mn}^{\ddagger} pedig a „csillapodási” szélesség, amely a bonyolultabb compound konfigurációkhoz való csatolódás nagyságára jellemző.

Az előző fejezetben tárgyalt rugalmas neutronszerzés esetén a csillapodástól eltekintettünk és Γ_{mn} szélességet a megszökési szélességgel azonosítottuk, ami indokolt is volt, mert a tekintetbe vett állapotoknál bonyolultabb compound konfigurációk csak jóval nagyobb gerjesztési energiánál fordulnak elő, ezért a járulékok elhanyagolható volt. A jelen esetben ezt az utat nem lehet követni, mert az izobár analóg állapotok környékén ezrével fordulnak elő sokkal bonyolultabb compound konfigurációk. A szélességet nem lehet azonosítani a megszökési szélességgel, figyelembe kell venni a csillapodást is. Szerencsére a komplex optikai potenciál ezt a problémát automatikusan megoldja, mert az explicite figyelembe nem vett konfigurációkba való átmenettel járó csillapodást a potenciál abszorpciót leíró imaginárius része több-kevesebb pontossággal már figyelembe veszi.

Érdemes még egy körülményre ráirányítani a figyelmet, mégpedig a nívóeltolódás és a nívószélesség formulájában szereplő $1/2T_>$ tényezőre, ami miatt mind az eltolódás, mind pedig a szélesség sokkal kisebb, mint a hasonló körülmények között létrejövő, de közönséges — nem izobár analóg jellegű — rezonancia eltolódása és szélessége.

Ennek a körülménynek kísérleti szempontból van nagy jelentősége, így ugyanis a kismértékű nívóeltolódás miatt a szomszédos izobár alacsonyan gerjesztett állapotainak ismeretében előre meg lehet jósolni az izobár analóg rezonanciák helyét, másrészt a kicsiny szélesség miatt ezek a rezonanciák markánsan ki tudnak emelkedni a fluktuáló háttérből.

Az eddigiek során kifejtett módszert konkrétan a $^{138}_{56}\text{Ba}_{82}$, a $^{140}_{58}\text{Ce}_{82}$ és a $^{142}_{60}\text{Nd}_{82}$ targetmagokon végrehajtott rugalmas proton szórás kísérletek elemzésére alkalmaztuk [40]. Mindhárom mag közös tulajdonsága, hogy egyrészt a neutronok száma éppen mágikus: $N=82$, másrészt a protonok száma páros. Az ilyen típusú magok alacsonyban fekvő gerjesztett állapotai általában elég jól értelmezhetők azzal a feltevessel, hogy a neutron rendszer megőrzi mágikus konfigurációját, és a proton rendszer vesz fel energiát, mégpedig nagy valószínűséggel, kollektív vibrációs gerjesztések formájában. A viszonyok nagyfokú hasonlósága miatt elegendő, ha a ^{138}Ba , a ^{140}Ce és a ^{142}Nd magokon végrehajtott szórás kísérletek közül csak egyet tárgyalunk teljes részletességgel. Minthogy a heidelbergi csoport jóvoltából a $^{142}\text{Nd}(p, p)^{142}\text{Nd}$ reakcióra vonatkozó kísérleti anyag állt rendelkezésünkre a legteljesebb formában, a következőkben illusztrációként ezt az esetet fogjuk elemezni [41–43].

A 83 neutron tartalmazó Nd izotóp izobárja a proton szórás során kialakuló $^{140}_{60}\text{Nd}_{82} + p$ rendszernek. A $^{143}_{60}\text{Nd}_{83}$ alacsonyban fekvő gerjesztett állapotait a ^{13}C esetéhez teljesen hasonlóan lehet értelmezni, nevezetesen feltételezzük, hogy a 82 neutron mágikus konfigurációja érintetlen marad, az utolsó 83-ik neutron a héjmodell szerint soronkövetkező $2g_{7/2}$, $2g_{5/2}$, $3p_{3/2}$ és $3p_{1/2}$ állapotok valamelyikében foglal helyet, a proton rendszer pedig vagy alapállapotban, vagy az első gerjesztett állapotban van, ami egy 2^+ spinű és paritású kollektív vibrációs jellegű állapot. A bázisrendszer tehát pontosan ugyanolyan, mint a ^{13}C esetén $|\Phi(J_0 j | J)\rangle$, ahol $J_0 (=0, 2)$ a proton rendszer, $j (=1/2, 3/2, 5/2, 7/2)$ az utolsó neutron, $J (=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2)$ pedig a teljes nukleon rendszer impulzusmomentumát jelöli.

A ^{13}C esetéhez viszonyítva a különbség csak abban áll, hogy míg a ^{12}C alap és gerjesztett állapotainak hullámfüggvényét a héjmodell segítségével szerkesztettük meg, addig a ^{142}Nd alap és gerjesztett állapotának hullámfüggvényét a kollektív modell egyik mikroszkópikus változatának a R(andom) P(hase) A(pproximation)-nak [44] a segítségével állítjuk elő.

A következő lépés abban áll, hogy az utolsó neutron és a ^{142}Nd nukleonjai között ható maradékkölcsönhatást is számításba vesszük oly módon, hogy elkészítjük a ^{143}Nd Hamilton-operátorának a mátrixát a $|\Phi(J_0 j | J)\rangle$ bázisrendszer segítségével és diagonalizáljuk [45]. A kapott energia sajátfüggvények jó közelítéssel sajátfüggvényei az izospinnek is: $|\Theta_m^{T_> T_>}\rangle$, ahol $T_> = 23/2$. Ezek után végrehajtva a $T_- / \sqrt{2T_>} |\Theta_m^{T_> T_>}\rangle$ operációt nyerjük a $|\Theta_m^{T_> T_>-1}\rangle$ izobár analóg állapotot, amely a „target alapállapot + proton” konfigurációnak megfelelő komponens kiprojiciálása után azonosítható a $|\Phi_m\rangle$ állapotfüggvénnyel.

A bemutatott eljárás lényegét jól szemléltetik a következő szimbolikus megfigyelések:

$$|\Phi(0, 3/2)\rangle \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \cdot \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad (\text{VI. 32})$$

$$|\Phi(2, j/2)\rangle \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \cdot \\ \hline \text{shaded square} \\ \hline \end{array} \quad (\text{VI. 33})$$

$$|\Theta_m^{T_> T_>}\rangle \rightarrow A \begin{array}{|c|} \hline \cdot \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + B \begin{array}{|c|} \hline \cdot \\ \hline \text{shaded square} \\ \hline \end{array}, \quad (A^2 + B^2 = 1) \quad (\text{VI. 34})$$

$$\begin{aligned} \frac{T_-}{\sqrt{2T_+}} |\theta_{m, T_+, T_-} \rangle \rightarrow & \frac{A}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \frac{A\sqrt{2T_+-1}}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \\ & + \frac{B}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \frac{B\sqrt{2T_+-1}}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \end{aligned} \quad (\text{VI. 35})$$

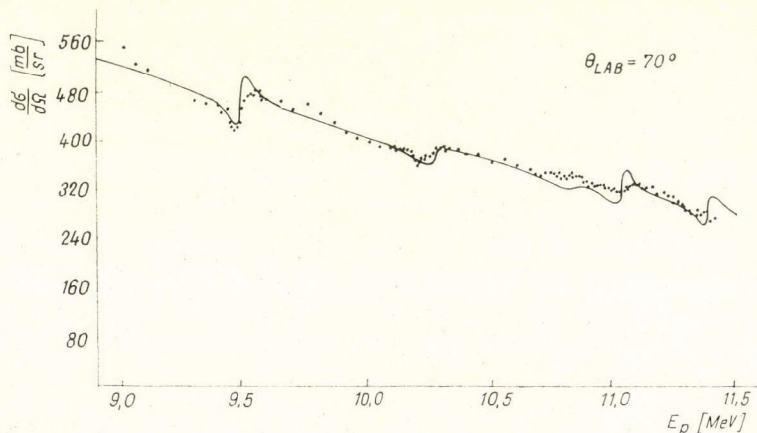
$$\begin{aligned} |\Phi_m \rangle \rightarrow & \left(1 - \frac{A^2}{2T_+}\right)^{-1/2} \left\{ \frac{A\sqrt{2T_+-1}}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \right. \\ & \left. + \frac{B}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \frac{B\sqrt{2T_+-1}}{\sqrt{2T_+}} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{VI. 36})$$

A $|\Phi_m\rangle$ kifejezésében szereplő $(1 - A^2/2T_+)^{-1/2}$ faktor a „target alapállapot + proton” konfiguráció kiprojiálása után szükségessé váló normálási együttható szerepét játssza.

A komplex optikai potenciál paramétereit oly módon határoztuk meg, hogy a kísérletileg jó energia felbontással mért hatáskeresztmetszeteket az energia szerint átlagoltuk úgy, hogy a rezonancia szerkezet teljesen kiátlagolódjon, majd pedig a potenciál paramétereit addig variáltuk, amíg az optikai modell keretein belül sikerült reprodukálni az átlagolt hatáskeresztmetszetek energia és szögfüggését. Ezek után kiszámítottuk a szórási amplitúdó első tagját (\mathcal{T}^{opt}) egészen $l_{\text{max}}=8$ -ig, a második tagját (\mathcal{T}^{res}) pedig az $l=1$ ($J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2$) és az $l=3$ ($J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2$) kvantumszámokkal jellemzett parciális hullámokra (a többi parciális hullám az alkalmazott modell keretein belül nem ad járulékot a szórási amplitúdóhoz).

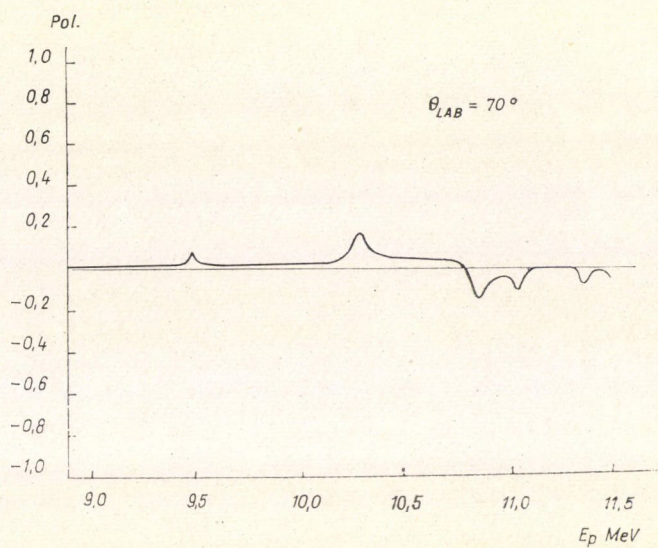
A szórási amplitúdó ismeretében meghatároztuk a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszetét és a szórt protonok polarizációját a $8,9 \leq E \leq 11,5$ MeV energiatartományban.

A kapott eredményeket a 3—10. ábrákon tüntettük fel.

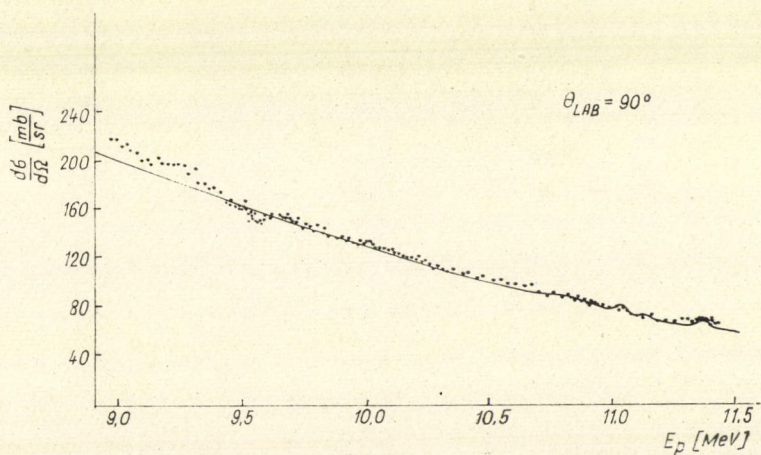


3. ábra

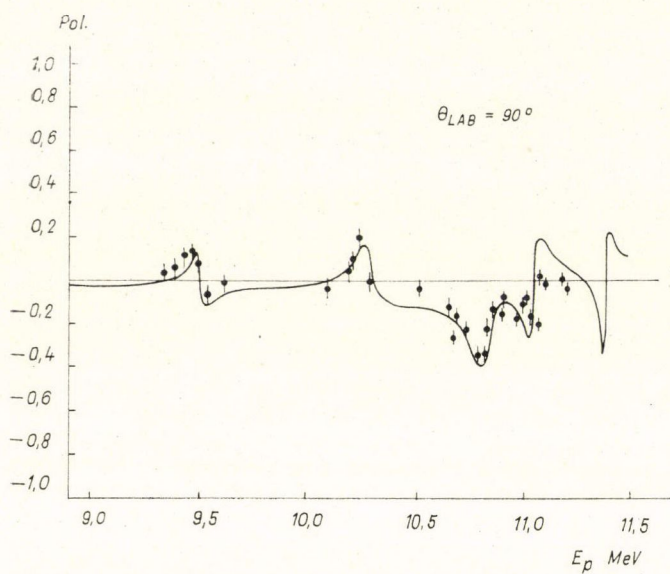
A számításokat megismételtük oly módon, hogy az egyes rezonanciák közötti csatolást „megszüntettük”, más szóval az $\langle m|A|n \rangle$ mátrix nem-diagonális elemeit elhanyagoltuk. Ebben az ún. „izolált, rezonancia” közelítésben a szórási amplitúdó



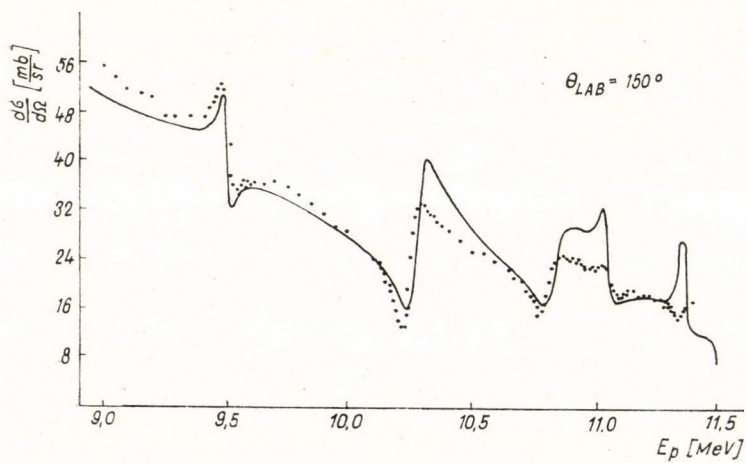
4. ábra



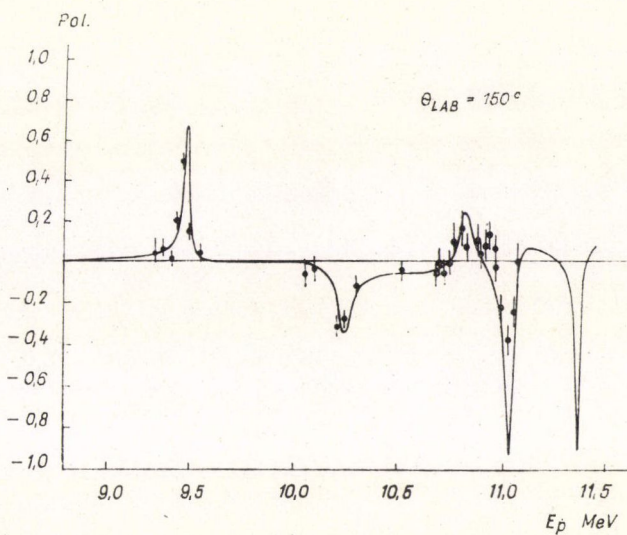
5. ábra



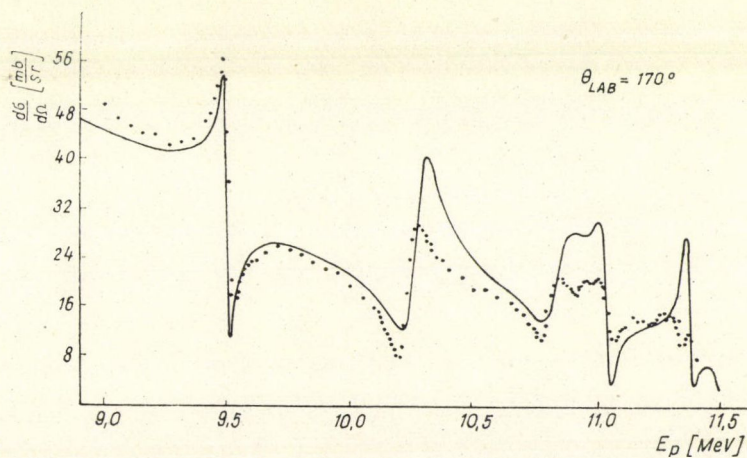
6. ábra



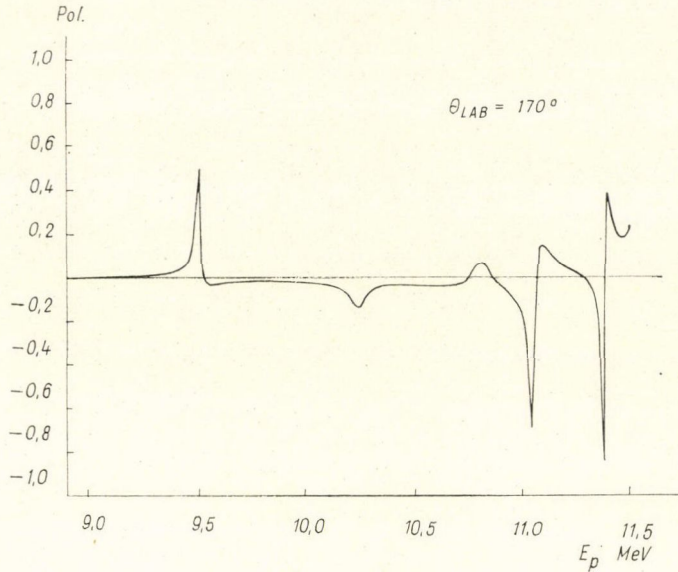
7. ábra



8. ábra



9. ábra



10. ábra

3—10. ábra. A ^{142}Nd atommagon történő rugalmas protonszórás differenciális hatáskeresztmetszete és a szórt protonok polarizációja az energia függvényében különböző szórési szögeknél. A differenciális hatáskeresztmetszetet a heidelbergi csoport [40], a polarizációt az erlangeni csoport [46] mérte.

a szokásos Breit—Wigner féle formulával írható le:

$$\mathcal{T}^{\text{res}} = \frac{1}{2T_+} \sum_r \frac{\langle \tilde{\varphi}_n^{(-)} | \mathcal{H}_{PQ} | \Theta_r^{T_+ T_+} \rangle \langle \Theta_r^{T_+ T_+} | \mathcal{H}_{QP} | \varphi_n^{(+)} \rangle}{E - (\mathcal{E}_r + \Delta E_c + \Delta_{rr}) + \frac{i}{2} \Gamma_{rr}} \quad (\text{IV. 37})$$

Az ily módon kapott eredmények nem különböznek észrevehetően az előzőektől jelezve, hogy az izobár analóg állapotok gyakorlatilag függetlenek, az egymáshoz való csatolódásuk teljesen elhanyagolható. A rezonanciaenergia és rezonancia szélesség közvetlenül definiálható, tehát a

$$\begin{aligned} \Gamma_r^{\text{res}} &= \Gamma_{rr} \\ E_r^{\text{res}} &= \mathcal{E}_r + \Delta E_c + \Delta_{rr} \end{aligned} \quad (\text{VI. 39})$$

képletekkel. Az ábrák alapján is, de különösen az I. táblázat alapján megállapíthatjuk, hogy a rezonancia paraméterek számított értéke egészen kitűnően egyezik a kísérleti adatokkal.

Az I. táblázat harmadik sorával kapcsolatban, mint érdekességet jegyezzük meg a következőket. A 10,8 MeV-nél jelentkező rezonanciához a számítások szerint az impulzusmomentumnak $3/2$ értéke tartozik. Ezen számítások közzététele idején a kísérletekből kielemezett érték nem $3/2$, hanem $1/2$ volt. A később elvégzett polarizációmérések eredményei [46], amelyeket most utólag tüntettünk fel az összehasonlítás kedvéért a 6. és 8. ábrán teljes egyezésben vannak a polarizáció számított értékeivel, jelezve, hogy a 10,8 MeV-es rezonancia spinje nem $1/2$ [47, 48], hanem a mi számításaink által megjósolt $3/2$.

I. TÁBLÁZAT

A ^{142}Nd atommagon történő rugalmas proton szórásban jelentkező izobár analóg rezonanciák paramétereit: rezonanciaenergia (E^{res}), teljes rezonancia szélesség (Γ^{res}), spin (J) és paritás (π).

E^{res} (MeV)		Γ^{res} (keV)		J^{π}	
kísérlet	elmélet	kísérlet	elmélet	kísérlet	elmélet
9,50	9,50	54	30	$7/2^-$	$7/2^-$
10,23	10,27	76	86	$3/2^-$	$3/2^-$
10,80	10,82	75	92	$3/2^-$	$1/2^-$
11,05	11,04	59	44	$5/2^-$	$5/2^-$

A kapott eredmények, illetve ezeknek a kísérleti adatokkal való összehasonlítása mutatja, hogy egyrészt a bemutatott eljárás „működik”, azaz használható a magreakciók során kialakuló bonyolult folyamatok elemzésére, másrészt a számítások során bevezetett feltevések, modellszerű elképzelések nincsenek nagyon messze a valóságtól.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a különböző modellek (a héjmodell, a kollektív modell és az optikai modell) segítségével nyert információkat egy flexibilis magreakció elmélet keretében össze lehet ötvözni úgy, hogy nemcsak a meglevő kísérleti adatok értelmezése, hanem bizonyos kísérleti tények előrejelzése is lehetővé válik.

VII. A rezonancia reakciók exaktul megoldható modellje

VII. 1. A magreakció modellek korlátai

Amint az előző két fejezetben láttuk, ahhoz, hogy egy magreakció lefolyását részletesen le lehessen írni, két dologra van szükség, nevezetesen:

1. a rendszer kontinuumba ágyazott kötött állapotainak leírására alkalmas modellre, valamint
2. egy korrektül felépített, de közelítések megfogalmazására is alkalmas magreakció modellre.

A héjmodell és a kollektív modell különböző variánsai között a legtöbb esetben meg lehet találni azt a konkrét változatot, amely a konkrét feladathoz illeszkedve alkalmas a kontinuumba ágyazott kötött állapotok leírására. Ennek a leírásnak a megbízhatóságát és pontosságát igen sokféle módon lehet növelni, többek között az átlagpotenciál, illetve az egyrészezske állapotok „self-consistenciájának” fokozásával, a maradék kölcsönhatás „realisztikusabb” megválasztásával, a konfigurációs tér dimenziójának növelésével stb. Azt lehet mondani, hogy csak arányérzék és számológép kapacitás kérdése, hogy meddig megyünk el a kötött állapotok leírására szolgáló modell pontosságának fokozásában.

A magreakciók leírásához szükséges másik kellék, a magreakció modell vonatkozásában, ezt már távolról sem lehet elmondani. Itt az egyik legfontosabb nehézség a következő: az n -testprobléma exakt megfogalmazásához szükség van az összes lehetséges $n-1$, $n-2$, $n-3$... kéttest alrendszerek exakt leírására. Ezt a követelményt ma még a háromtest probléma esetén sem könnyű teljesíteni, ezért gyakorlatilag az összes létező magreakció modell, sőt még a formális magreakció elméletek is

arra az alapfeltevésre vannak felépítve, hogy a magreakció során a nukleáris rendszer csupán két fragmensre lehet szétoszolva. Nukleon szórás esetén ez azt jelenti, hogy egy kivétellel az összes nukleon kötött állapotban kell hogy tartózkodjék és a kontinuumban csak egyetlen nukleon lehet. Röviden megfogalmazva gyakorlatilag az összes magreakció modell *kéttest* modell.

Ez alól a Feshbach féle magreakció elmélet sem képez kivételt. Az előző két fejezetben ezt nem hangsúlyoztuk ugyan, de azonnal nyilvánvalóvá válik, ha meggondoljuk, hogy a leírás kiindulási pontját az optikai modell szolgáltatja, amely egy kéttest modell: A bombázó nukleon egy a targetet „megszemélyesítő” potenciáltérben mozog, az így kialakult — torzított hullámokkal leírható — állapotból a maradék kölcsönhatás révén időlegesen átkerül kötött egyrészecske állapotokba, miközben a target rendszer is gerjesztődik. Ezen leírásmód keretében tehát tényleg csak legfeljebb egy nukleon lehet a kontinuumban.

Míg a kötött állapotok leírására szolgáló modellek „minőségét” azaz pontosságát és megbízhatóságát „folytonosan” lehet fokozni, addig a magreakció modelleket nem lehet „folytonos” módon javítani: vagy kidolgozunk kettőnél *több* részecskés modelleket, vagy maradunk a *kéttest* modell keretei között.

Amint már többször hangsúlyoztuk a kettőnél több részecskés modellek kidolgozását, egyelőre igen súlyos matematikai nehézségek nehezítik, ezért minden valószínűség szerint a közeljövőben még rá leszünk kényszerülve arra, hogy kéttest modellekkel dolgozzunk. Az viszont arányérzék hiányára vallana, sőt egyszerűen értelmetlen lenne, ha a kéttest modelleket még akkor is tovább akarnánk javítani, amikor már régen túl vagyunk a modell kéttest jellegéből származó megbízhatósági határán. Ehhez viszont jó lenne tudni, hogy hol van ez a határ, azaz, hogy milyen jellegűek és milyen mértékűek azok a hibák, amelyek a kéttest modell elkerülhetetlen velejárói.

A továbbiakban ezzel a problémával fogunk foglalkozni. A módszer lényege a következő: megszerkesztünk egy olyan egyszerű háromrészecske modellt, amely:

1. magába foglalja a magreakciók probléma-körének minden lényeges elemét,
2. exaktul megoldható, és amely
3. megoldható a különböző kéttest reakció modellek keretei között is.

Ha sikerül egy ilyen modellt megszerkeszteni és megoldani, akkor az egzakt megoldás birtokában lehetőségünk nyílik a kétrészecskés reakció modellek kvantitatív ellenőrzésére.

VII. 2. A modell [49—50]

Könnyű belátni, hogy a háromrészecske rendszer az a legegyszerűbb rendszer, amelyben egynél többféle rezonancia-jelenség fordulhat elő. Ahhoz, hogy különböző rezonancia-jelenségek ténylegesen is előforduljanak, az szükséges, hogy a kétrészecskés alrendszerek közül legalább az egyikben létezzen legalább két kötött állapot és legalább az egyik kétrészecskés alrendszerben létezzen legalább egy potenciál rezonancia.

A modellt tehát úgy konstruáljuk meg, hogy az háromrészecskéből álljon, az egyszerűség kedvéért feltételezve, hogy kettő közülük azonos tömegű, a harmadik tömege pedig végtelen: $m_1 = m_2 = m$, $m_3 = \infty$. A rendszer Hamilton operátora:

$$H(1, 2, 3) = t(1) + t(2) + V(1, 2) + V(1, 3) + V(2, 3), \quad (\text{VII. 1})$$

ahol $t(i)$ a kinetikus energia $V(i, j)$ pedig a kölcsönhatási energia operátora.

Feltételezve, hogy a kölcsönhatás nemlokális, szeparálható potenciálokkal írható le és bevezetve a $\hbar = 1$, $m = 1/2$ egységeket, a Hamilton operátorban szereplő tagokat impulzusreprezentációban képezett mátrixelemeikkel definiáljuk:

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | t(i) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}'_2) k_i^2, \quad (\text{VII. 2})$$

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V(2, 3) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = -\delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) \sum_{r=1}^{N_1} g_{(1)r}(\vec{k}_2) g_{(1)r}^*(\vec{k}'_2), \quad (\text{VII. 3})$$

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V(1, 3) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = -\delta(\vec{k}_2 - \vec{k}'_2) \sum_{r=1}^{N_2} g_{(2)r}(\vec{k}_1) g_{(2)r}^*(\vec{k}'_1), \quad (\text{VII. 4})$$

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V(1, 2) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = -\delta(\vec{p} - \vec{p}') \sum_{r=1}^{N_3} g_{(3)r}(\vec{k}) g_{(3)r}^*(\vec{k}'), \quad (\text{VII. 5})$$

ahol \vec{p} a kétrészecske teljes impulzusa: $\vec{p} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$, \vec{k} pedig a relatív impulzus: $\vec{k} = 1/2(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$.

Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a kölcsönhatás spinfüggetlen és csak relatív s állapotok esetén különbözik zérustól. Ez a feltevés automatikusan teljesül, ha a $g_{(x)r}(\vec{k})$ tényezőket úgy választjuk meg, hogy csak \vec{k} abszolút értékétől függjenek:

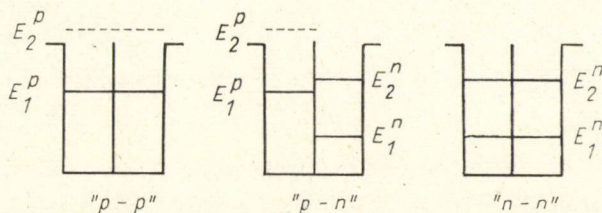
$$g_{(x)r}(\vec{k}) = \lambda_{(x)r} \left[\frac{1}{\beta_{(x)r}^2 + k^2} - \frac{\delta_{(x)r}}{\gamma_{(x)r}^2 + k^2} \right] \quad (\text{VII. 6})$$

A kölcsönhatások erősségét és hatótávolságát a λ , δ , illetve a β , γ paraméterek határozzák meg.

A többtagú, nemlokális, szeparálható potenciálok egyik jólismert tulajdonsága az, hogy legfeljebb annyi kötött állapotot képesek produkálni, amennyi a negatív előjelű tagok száma. Ha tehát $N_1 = 2$ és $N_2 = 2$, akkor a potenciál paraméterek megfelelő választásával elérhető, hogy az $(\alpha, 3)$ kétrészecskes alrendszerben két kötött állapot legyen.

A potenciál paramétereknek másfajta választásával viszont elérhető, hogy egy kötött állapot és egy potenciál rezonancia jöjjön létre. A rövidség kedvéért az első esetben az α -ik részecskét „neutronnak” a második esetben „protonnak” fogjuk hívni.

Ezek szerint tehát a potenciál paraméterek megfelelő megválasztásával három lényegesen különböző, nevezetesen egy „proton-proton”, egy „proton-neutron” és egy „neutron-neutron” rendszert valósíthatunk meg, amelyek tulajdonságait a 11. ábra szemlélteti.



11. ábra. A kötött egyrészecske állapotok és az egyrészecske jellegű rezonanciák a „p-p”, „p-n” és „n-n” rendszerben

Foglalkozunk először az (1, 3) és (2, 3) kétrészecskés alrendszerekkel. Amint már megállapítottuk, ezekben az alrendszerekben legfeljebb két kötött állapot van, amelyek a

$$k^2 \varphi_{(z)i}(\vec{k}) + \int \langle \vec{k} | V_a | \vec{k}' \rangle \varphi_{(z)i}(\vec{k}') d\vec{k}' = E_{(z)i} \varphi_{(z)i}(\vec{k}), \quad (0 \leq i \leq 2) \quad (\text{VII. 7})$$

Schrödinger egyenletből határozhatók meg:

$$\varphi_{(z)i}(\vec{k}) = \frac{1}{k^2 - E_{(z)i}} \sum_{r=1}^2 N_{(z)r}^i g_{(z)r}(k) \quad (\text{VII. 8})$$

Az $N_{(z)r}^i$ együtthatók a

$$\sum_{r=1}^2 M_{sr}^{(z)}(E_{(z)i}) N_{(z)r}^i = 0 \quad (\text{VII. 9})$$

egyenletrendszer megoldásai, ahol

$$M_{sr}^{(z)}(z) = \delta_{sr} + 4\pi \int_0^\infty \frac{g_{(z)s}(k) g_{(z)r}(k)}{z - k^2} k^2 dk \quad (\text{VII. 10})$$

Az $E_{(z)i}$ energia sajátértékek az egyenletrendszer megoldhatósági feltételeként szolgáló

$$\det [M_{sr}^{(z)}(E_{(z)i})] = 0 \quad (\text{VII. 11})$$

szekuláris egyenlet megoldásával nyerhetők.

A nem-lokális, szeparálható potenciál lehetővé teszi, hogy a kétrészecské T -mátrixra vonatkozó

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_\beta(z) &= V_\beta + V_\beta G_0(z) \mathcal{T}_\beta(z) \\ (\alpha, \beta &= 1, 2; \quad \alpha \neq \beta; \quad V_\beta \equiv V(\alpha, 3)) \end{aligned} \quad (\text{VII. 12})$$

Lippmann—Schwinger egyenlet megoldását is, a hullámfüggvényhez hasonlóan közelítésmentesen, explicit alakba írhatjuk fel:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathcal{T}_\beta(z) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle &= -\delta(\vec{k}_\beta - \vec{k}'_\beta) \cdot \\ \sum_{r=1}^2 g_{(\beta)r}(\vec{k}_\alpha) g_{(\beta)\delta}^*(\vec{k}'_\alpha) [M^{(\beta)}(z - k_\beta^2)]_{rs}^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{VII. 13})$$

$$\alpha, \beta = 1, 2; \quad \alpha \neq \beta.$$

Ez a T -mátrix a potenciál paraméterek értékétől függően legfeljebb egy potenciál rezonanciát tartalmazhat.

Az (1, 2) kétrészecskés alrendszerben az $N_3 = 1$ választás esetén, legfeljebb egy kötött állapot létezhet, ezt a rövidség kedvéért „deuteronnak” nevezzük. A „deuteron” kialakulásához az szükséges, hogy az

$$M_{11}^{(3)}(E_{(3)1}) = 0 \quad (\text{VII. 14})$$

egyenlet teljesüljön, ahol

$$M_{11}^{(3)}(z) = 1 + 4\pi \int_0^\infty \frac{g_{(3)1}(k) g_{(3)1}(k)}{z - 2k^2} k^2 dk \quad (\text{VII. 15})$$

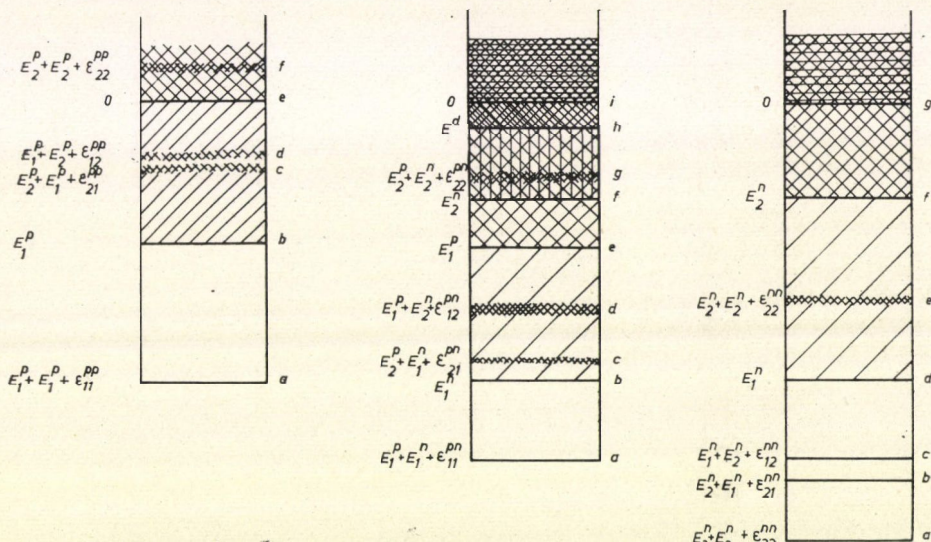
A „deuteron” hullámfüggvénye explicit alakban felírható:

$$\varphi_{(3)1}(\vec{k}) = \frac{1}{k^2 - \frac{1}{2} E_{(3)1}} N_{(3)1} g_{(3)1}(k) \quad (\text{VII. 16})$$

és hasonlóképpen a T -mátrix:

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathcal{T}_3(z) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = -\delta(\vec{p} - \vec{p}') g_{(3)1}(k) g_{(3)1}(k) \left[M^{(3)} \left(z - \frac{1}{2} p^2 \right) \right]_{11}^{-1}. \quad (\text{VII. 17})$$

A három különböző rendszer spektrumát a 12. ábrán mutatjuk be.



12. ábra., A „p—p”, a „p—n” és az „n—n” rendszer spektruma

Az előforduló rezonanciákat egyszerűen osztályozhatjuk a részecskék konfigurációja alapján:

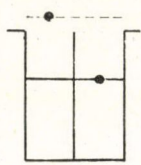
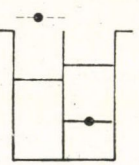
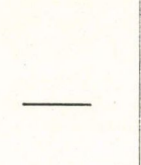
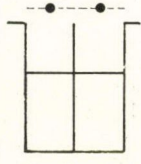
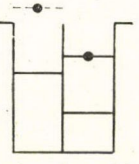
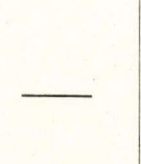

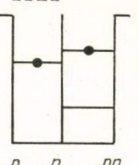
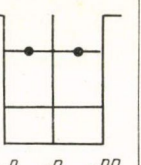
1. Potenciál rezonanciának nevezzük az olyan rezonanciát, amelynél a target alapállapotban, a bombázó részecske pedig valamilyen rezonáns egyrészecske állapotban van.
2. Compound rezonanciának nevezzük az olyan rezonanciát, amelynél minden részecske kötött egyrészecske állapotban van.
3. Kvázi-compound rezonanciának nevezzük az olyan rezonanciát, amelynél a target gerjesztett állapotban, a bombázó részecske pedig valamilyen rezonáns egyrészecske állapotban van.

Az előforduló rezonanciákat, illetve a hozzájuk tartozó konfigurációkat a 13. ábrán mutatjuk be.

Félreértések elkerülése végett meg kell jegyezni, hogy az ezen modell keretében bevezetett compound és kvázi-compound rezonanciát, az általánosan elfogadott szóhasználat szerint „kétrészecske—egy-lyuk” konfigurációhoz tartozó doorway

rezonanciának kellene nevezni, de mivel az adott modellben ezeknél bonyolultabb rezonanciák eleve nem fordulhatnak elő, azért indokolt ezeket compound, illetve kvázi-compound rezonanciának nevezni.

Az elmondottak alapján világos, hogy a (VII. 1) alatti Hamilton-operátornak a (VII. 2)—(VII. 5) képletekkel megadott definíciójával egy olyan háromrészeske modellt definiáltunk, amely alkalmas a magreakciók során lezajló jelenségek többségének, nevezetesen, a rugalmas és rugalmatlan szórásnak, a pick-up, a stripping, a kicserélődési és a felbomlási reakcióknak, valamint a különböző rezonanciajelenségeknek a tanulmányozására.

$p-p$	$p-n$	$n-n$	
 $E_1^p + E_2^p + \varepsilon_{12}^{pp}$	 $E_2^p + E_1^n + \varepsilon_{21}^{pn}$	 $E_2^n + E_1^n + \varepsilon_{21}^{nn}$	Potenciál rezonanciák
 $E_2^p + E_2^p + \varepsilon_{22}^{pp}$	 $E_2^p + E_2^n + \varepsilon_{22}^{pn}$	 $E_2^n + E_2^n + \varepsilon_{22}^{nn}$	Kvázi-Compound rezonanciák
 $E_1^p + E_2^n + \varepsilon_{12}^{pn}$	 $E_2^n + E_2^n + \varepsilon_{22}^{nn}$	 $E_2^n + E_2^n + \varepsilon_{22}^{nn}$	Compound rezonanciák

13. ábra. A rezonanciák osztályozása a részecske konfiguráció alapján

A kérdés most már csak az, hogy a modell megoldható-e?

Ezen kérdés eldöntése végett vegyük vizsgálat alá a III. 3. fejezetben (III. 23) alatt már felírt

$$U_{\beta\alpha}(z) = (1 - \delta_{\beta\alpha})(z - H_0) + \sum_{\gamma} (1 - \delta_{\beta\gamma}) \mathcal{T}_{\gamma}(z) G_0(z) U_{\gamma\alpha}(z) \quad (\text{VII. 18})$$

Faddeev egyenleteket.

Az itt szereplő H_0 és $G_0(z)$ operátorokat a modellünk keretein belül a

$$H_0 = t(1) + t(2) \quad (\text{VII. 19})$$

és

$$G_0(z) = [z - t(1) - t(2)]^{-1} \quad (\text{VII. 20})$$

egyenletek definiálják. A H_0 és $G_0(z)$ mátrixelemei a

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | H_0 | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}'_2) (k_1^2 + k_2^2) \quad (\text{VII. 21})$$

és

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | G_0(z) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}'_2) (z - k_1^2 - k_2^2)^{-1} \quad (\text{VII. 22})$$

képletekkel adhatók meg.

A $\mathcal{T}_\gamma(z)$ mátrixelemeit a (VII. 13) és (VII. 17) alatti képletek szolgáltatják.

Vezessük be a

$$H_\alpha = H_0 + V_\alpha \quad (\text{VII. 23})$$

csatorna Hamilton operátort, valamint a

$$H_\alpha |\Phi_{\alpha a}\rangle = E |\Phi_{\alpha a}\rangle \quad (\text{VII. 24})$$

egyenlet megoldásaként a $|\Phi_{\alpha a}\rangle$ csatorna hullámfüggvényt, amely impulzus reprezentációban az $\alpha = 1$ esetben például a következőképp adható meg:

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \Phi_{\alpha a} \rangle = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_{1a}) \varphi_{(1)a}(\vec{k}_2), \quad (\text{VII. 25})$$

ahol \vec{k}_{1a} az 1 számú bombázó részecske impulzusa, $\varphi_{(1)a}(\vec{k}_2)$ pedig a (2, 3) alrendszer valamely kötött állapota. A $|\Phi_{\alpha a}\rangle$ kezdő és $|\Phi_{\beta b}\rangle$ végállapotok közti átmenet valószínűségi amplitúdóját, amint azt a III. 3. fejezetben megbeszéltük, a

$$\langle \Phi_{\beta b} | U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle$$

mátrixelemnek az energiahéjon vett értéke szolgáltatja. Annak érdekében, hogy ezt a mennyiséget meghatározhassuk, szorozzuk a Faddeev egyenleteket jobbról $|\Phi_{\alpha a}\rangle$ -val, és balról $\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | G_0(z)$ -vel:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | G_0(z) U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle = \\ & = (1 - \delta_{\beta\alpha}) \Phi_{\alpha a}(\vec{k}_1 \vec{k}_2) + \sum_{\gamma} (1 - \delta_{\beta\gamma}) \int \frac{\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathcal{T}_{\gamma}(z) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle \langle \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 | G_0(z) U_{\gamma\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k}'_1 d\vec{k}'_2}{z - k_1^2 - k_2^2} \end{aligned} \quad (\text{VII. 26})$$

Ezek után szorozzuk meg ezen egyenleteket rendre $g_{(1)s}(\vec{k}_2)$, $g_{(2)s}(\vec{k}_1)$ és $g_{(3)1}(\vec{k})$ -val és integráljuk \vec{k}_2 , \vec{k}_1 és \vec{k} szerint, valamint vezessük be az

$$\begin{aligned} F_s^{(1x)}(\vec{k}_1, \vec{k}_{\alpha a}, z) &= - \int g_{(1)s}(\vec{k}_2) \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | G_0(z) U_{1\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k}_2 \\ F_s^{(2x)}(\vec{k}_2, \vec{k}_{\alpha a}, z) &= - \int g_{(2)s}(\vec{k}_1) \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | G_0(z) U_{2\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k}_1 \\ F_s^{(3x)}(\vec{p}, \vec{k}_{\alpha a}, z) &= - \int g_{(3)s}(\vec{k}) \langle \vec{k} \vec{p} | G_0(z) U_{3\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k} \end{aligned} \quad (\text{VII. 27})$$

jelöléseket.

Felhasználva a T -mátrix konkrét alakját, eredményül az

$$F_s^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) = f_s^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) + \sum_r \sum_\gamma (1 - \delta_{\beta\gamma}) \int K_{sr}^{(\beta\gamma)}(\vec{x}, \vec{y}, z) F_r^{(\gamma\alpha)}(\vec{y}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) d\vec{y} \quad (\text{VII. 28})$$

integrálegyenlet rendszert nyerjük, ahol a magfüggvényeket a

$$\begin{aligned} K_{sr}^{(\beta\gamma)}(\vec{x}, \vec{y}, z) &= \sum_i \frac{g_{(\beta)s}(\vec{y}) g_{(\gamma)i}(\vec{x})}{x^2 + y^2 - z} [M^{(\gamma)}(z - y^2)]_{ir}^{-1}, \\ K_{sr}^{(\gamma\beta)}(\vec{x}, \vec{y}, z) &= \sum_i \frac{g_{(\gamma)s}(\vec{x} - \vec{y}) g_{(\beta)i}(\vec{x} - \frac{1}{2} \vec{y})}{x^2 + (\vec{x} - \vec{y})^2 - z} [M^{(\beta)}(z - \frac{1}{2} y^2)]_{ir}^{-1} \quad (\text{VII. 29}) \\ K_{sr}^{(3\gamma)}(\vec{x}, \vec{y}, z) &= \sum_i \frac{g_{(3)s}(\vec{y} - \frac{1}{2} \vec{x}) g_{(\gamma)i}(\vec{y} - \vec{x})}{y^2 + (\vec{y} - \vec{x})^2 - z} [M^{(\gamma)}(z - y^2)]_{ir}^{-1} \\ &\quad \beta = 1, 2; \quad \gamma = 1, 2; \end{aligned}$$

egyenletek definiálják.

Az egyenletek inhomogenitását adó tagokat pedig az alábbi képletek szolgáltatják:

$$\begin{aligned} f_s^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) &= (\delta_{\beta\alpha} - 1) g_{(\beta)s}(\vec{k}_{\alpha\alpha}) \varphi_{(\alpha)a}(\vec{x}), \\ f_s^{(\beta\beta)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) &= (\delta_{\beta\beta} - 1) g_{(\beta)s}(\vec{k}_{\alpha\alpha} - \vec{x}) \varphi_{(\alpha)a}(\vec{x} - \frac{1}{2} \vec{k}_{\alpha\alpha}), \\ f_s^{(3\beta)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) &= (\delta_{3\beta} - 1) g_{(3)s}(\vec{k}_{\alpha\alpha} - \frac{1}{2} \vec{x}) \varphi_{(\alpha)a}(\vec{x} - \vec{k}_{\alpha\alpha}) \\ &\quad \alpha = 1, 2; \quad \beta = 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{VII. 30})$$

Az egyenletrendszerben előforduló mennyiségeket fejtsük sorba gömbfüggvények szerint:

$$\begin{aligned} F_s^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{k}_{\alpha\alpha}, z) &= \sum_{lm} \frac{1}{x k_{\alpha\alpha}} \mathcal{F}_s^{(\beta\alpha)l}(x, k_{\alpha\alpha}, z) Y_{lm}^*(\Omega_x) Y_{lm}(\Omega_x), \\ K_{sr}^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{y}, z) &= \sum_{lm} \frac{1}{xy} \mathcal{K}_{sr}^{(\beta\alpha)l}(x, y, z) Y_{lm}^*(\Omega_x) Y_{lm}(\Omega_y), \\ f_s^{(\beta\alpha)}(\vec{x}, \vec{y}, z) &= \sum_{lm} \frac{1}{x k_{\alpha\alpha}} f_s^{(\beta\alpha)l}(x, k_{\alpha\alpha}, z) Y_{lm}^*(\Omega_x) Y_{lm}(\Omega_x), \end{aligned} \quad (\text{VII. 31})$$

Ezen sorfejtéseket az egyenletrendszerbe helyettesítve kapjuk, hogy

$$\mathcal{F}_s^{(\beta\alpha)l}(x, k_{\alpha\alpha}, z) = f_s^{(\beta\alpha)l}(x, k_{\alpha\alpha}, z) + \sum_r \sum_\gamma (1 - \delta_{\beta\gamma}) \int \mathcal{K}_{sr}^{(\beta\gamma)l}(x, y, z) \mathcal{F}_r^{(\gamma\alpha)l}(y, k_{\alpha\alpha}, z) dy \quad (\text{VII. 32})$$

Azt a nevezetes eredményt kaptuk tehát, hogy a Faddeev-egyenletek egyváltozós integrálegyenletrendszerre redukálódtak. Könnyen belátható, hogy ez csak szeparálható, nem-lokális potenciálok esetén következik be. Általános esetben (pl. lokális potenciálok esetén) kétváltozós integrálegyenletekhez jutunk, amelyek jelenleg nagyteljesítményű számológépen is, csak közelítő módszerekkel oldhatók meg.

Felhasználva a Gauss kvadratura néven ismert eljárást, az integrálokat véges összegekkel helyettesíthetjük és így az egyváltozós integrálegenletrendszer, közönséges egyenletrendszerré alakítható át, amely azután valamilyen numerikus eljárással, például mátrixinverzióval, minden elvi nehézség nélkül megoldható.

A megoldás birtokában az átmeneti mátrixelemeket egyszerűen kiszámíthatjuk. Ebből a célból végezzük el a következő átalakításokat:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\beta b} | U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle &= \int \Phi_{\beta b}^*(\vec{k}_1, \vec{k}_2) (z - k_1^2 - k_2^2) \langle \vec{k}_1, \vec{k}_2 | G_0(z) U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 = \\ &= - \sum_s N_{(\beta)s}^b \int \frac{z - k_{\beta b}^2 - k_\gamma^2}{E_{(\beta)b} - k_\gamma^2} g_{(\beta)s}^*(\vec{k}_\gamma) \langle \vec{k}_\gamma, \vec{k}_{\beta b} | G_0(z) U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle d\vec{k}_\gamma \quad (\text{VII. 33}) \end{aligned}$$

Válasszuk a z paramétert úgy, hogy az a végállapot teljes energiáját adja:

$$z = E_{(\beta)b} + k_{\beta b}^2 + i\varepsilon \quad (\text{VII. 34})$$

Eredményül kapjuk, hogy

$$\langle \Phi_{\beta b} | U_{\beta\alpha}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle = \sum_s N_{(\beta)s}^b F_s^{(\beta\alpha)}(\vec{k}_{\beta b}, \vec{k}_{\alpha a}, z) \quad (\text{VII. 35})$$

Ha kikötjük, hogy fennálljon a $z = E_{(\alpha)a} + k_{\alpha a}^2 + i\varepsilon$ egyenlőség is, akkor a $\langle \Phi_{\beta a} | U_{\beta b}(z) | \Phi_{\alpha a} \rangle$ mátrixelemnek az energiahéjon vett értékét kapjuk, amely az átmenet valószínűségi amplitúdóját adja. Végül könnyen belátható, hogy az $(\alpha a) \rightarrow (\beta b)$ folyamat differenciális hatáskeresztmetszete a

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\beta b, \alpha a}}{d\Omega_\beta} &= \frac{(2\pi)^2}{4} \frac{k_{\beta b}}{k_{\alpha a}} \left| \sum_s N_{(\beta)s}^b F_s^{(\beta\alpha)}(\vec{k}_{\beta b}, \vec{k}_{\alpha a}, z) \right|^2 \\ (E_{(\alpha)a} + k_{\alpha a}^2 + i\varepsilon = z = E_{(\beta)b} + k_{\beta b}^2 + i\varepsilon) \end{aligned} \quad (\text{VII. 36})$$

képlettel fejezhető ki.

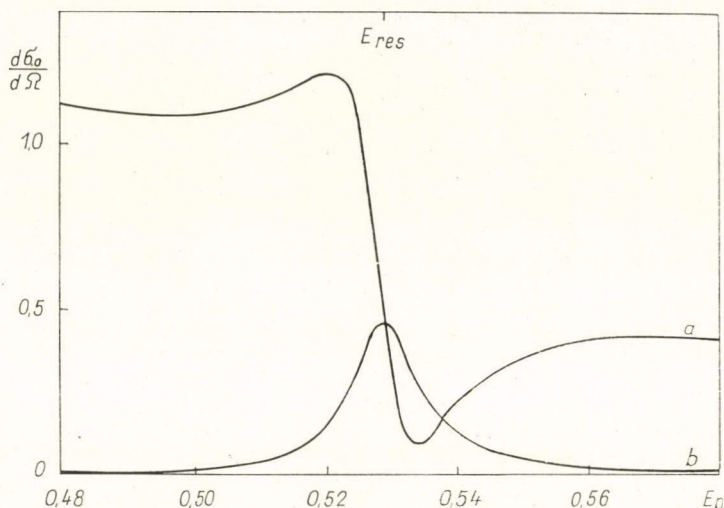
Az elmondottak alapján megállapíthatjuk tehát, hogy a (VII. 1) alatti Hamilton operátorral definiált háromrészesecske modell esetén, az összes lehetséges folyamat hatáskeresztmetszete exaktul kiszámítható.

VII. 3. A modell alkalmazásai

Az előzőekben bemutatott exaktul megoldható modell szerepe abban áll, hogy segítségével ellenőrizhető a különböző magreakció modellek megbízhatósága és a különböző közelítések jósága. A modell kidolgozása során azonban kitűnt, hogy jelentősége ennél jóval nagyobb, mert segítségével egyrészt tanulmányozható a különböző reakció csatornák, a különböző rezonanciák és általában a különböző jelenségek egymásrahatása, másrészt módszeresen felderíthető az az út, amely általánosabb, illetve realiztikusabb modellek megszerkesztéséhez vezet.

Ezen utóbbi lehetőség kapcsán itt most csupán azt említjük meg, hogy bizonyos kezdeti sikerek már születtek a modellnek az izobár analóg rezonanciák leírására való kiterjesztése tekintetében [52]. Ugyancsak megtettük a kezdeti lépéseket egy jóval általánosabb modell kidolgozása útján [53].

A különböző reakció csatornák, és a különböző rezonanciák egymáshatásának a kérdésével itt szintén nem akarunk részletesen foglalkozni, csupán illusztrációként mutatjuk be a 14. ábrán a rugalmas és rugalmatlan „proton” szórás hatáskeresztmetszetében jelentkező kvázicompound rezonanciát [51], [54].



14. ábra. Kvázicompound rezonancia az alapállapotban levő „törzs + n” rendszeren történő „p” szórásban. Rugalmas szórás: a. Rugalmatlan szórás: b.

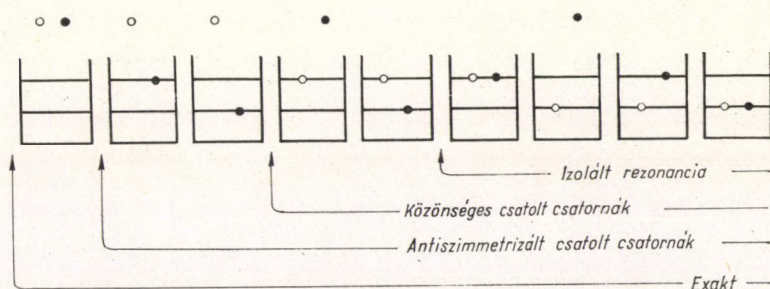
A különböző magreakció modellek kvantitatív ellenőrzése céljából egy „neutron-neutron” rendszer esetén végeztünk részletes számításokat [50]. Első lépésként kiszámítottuk a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetét a (compound) rezonancia környékén. Ezután meghatároztuk a rezonancia energiáját és szélességét. A számításokat elvégeztük.

1. az exaktul megoldható modell keretén belül,
2. a Bloch—Gillet [7], illetve Weidenmüller [6]-féle magreakció elméletének megfelelő közelítésben, (antiszimmetrizált, csatolt csatornák);
3. a Feshbach [8], illetve Tamura [10]-féle magreakció elméletnek megfelelő közelítésben, (közönséges, csatolt csatornák), és végül
4. a Feshbach [8], illetve Balasov [55]-féle „izolált rezonancia” közelítésben.

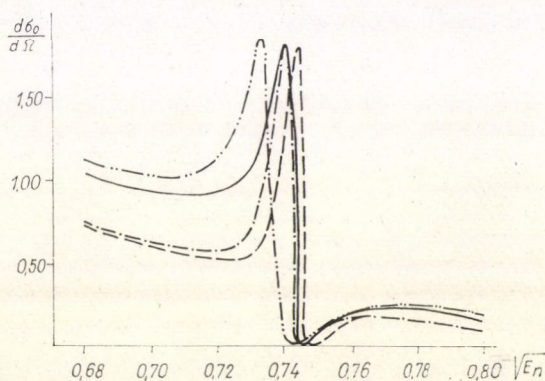
Ezen közelítő eljárások részleteit itt most mellőzzük, csupán a lényeget foglaljuk össze. A 15. ábra a „neutron-neutron” rendszer lehetséges konfigurációit mutatja és egyben feltüntettük azt is, hogy az egyes közelítő eljárások mely konfigurációkat veszik számításba.

Látható, hogy egyedül az exakt modell képes számításba venni azt a konfigurációt is, amelyben kétrészecske található a kontinuumban. Ez az a minőségileg új vonás, amely per definíciót hiányzik az összes kétrészecskés modellből.

A 16. ábrán illusztrációként bemutatjuk a kapott hatáskeresztmetszet görbékét. A II. táblázatban pedig feltüntetjük a különböző eljárások esetén kapott rezonancia



15. ábra. A lehetséges részecske konfigurációk az „n—n” rendszerben, a különböző közelítő módszerek „hatáskörének” illusztrálására



16. ábra. Az exakt és a közelítő módszerekkel kapott rugalmas szórás hatáskeresztmetszetek az „n—n” rendszerben jelentkező compound rezonancia környékén.

— · — · — exakt, ——— antiszimmetrizált, csatolt csatornák,
— — — közösleges, csatolt csatornák,
····· izolált rezonancia

paramétereket. Az összehasonlításból kitűnik, hogy a közelítő módszerekkel kapott eredmények lényegesen különböznek az exakt modell eredményeitől.

Ebből első látásra meglehetősen pesszimista következtetést kellene levonni, nevezetesen azt, hogy a magreakciók leírásához a kéttest modellek csak gyenge közelítést szolgáltatnak. Elképzelhető azonban, hogy a kéttest modellek esetleg mégis csak tűrhető közelítést adják az exakt problémának, ha nem a „valódi” kölcsönhatásokat használjuk, hanem helyettük valami ügyes módon megszerkesztett „effektív” kölcsönhatásokat vezetünk be. Érdeemes megjegyezni, hogy voltaképp az optikai modellben fontos szerepet játszó komplex potenciál is ilyen „effektív” kölcsönhatásnak tekinthető.

Ennek alapján az előző pesszimista következtetést egy valamennyire optimistábbal helyettesítjük, nevezetesen azzal, hogy ha magreakciók leírásához valamilyen kéttest modellből indulunk ki, akkor *nem szabad* a „valódi” kölcsönhatásokat használni, hanem helyettük a modell hibáját valamelyest kompenzáló „effektív” kölcsönhatásokat kell bevezetni.

II. TÁBLÁZÁT

Az "n—n" rendszerben jelentkező compound rezonancia paraméterei: a rezonanciaenergia (E^{res}) és a rezonancia szélesség (Γ^{res}), valamint a potenciál paraméterek.

	$\lambda_{(3)1}=0,954$ $\beta_{(3)1}=2,5$		$\lambda_{(3)1}=1,350$ $\beta_{(3)1}=2,5$		$\lambda_{(3)1}=1,909$ $\beta_{(3)1}=2,5$	
	E^{res}	Γ^{res}	E^{res}	Γ^{res}	E^{res}	Γ^{res}
Exakt	0,543	0,0117	0,499	0,0330	0,333	0,0709
Antiszimmetrizált, csatolt csatornák	0,551	0,0094	0,525	0,0253	0,478	0,0609
Közönséges, csatolt csatornák	0,553	0,0042	0,528	0,0104	0,486	0,0223
Izolált rezonancia	0,548	0,0054	0,519	0,0146	0,477	0,0343
$\lambda_{(1)1}=\lambda_{(2)1}=0,725$	$\lambda_{(1)2}=\lambda_{(2)2}=0,900$		$\delta_{(1)2}=\delta_{(2)2}=4,178$			
$\beta_{(1)1}=\beta_{(2)1}=1,200$	$\beta_{(1)2}=\beta_{(2)2}=1,000$		$\gamma_{(1)2}=\gamma_{(2)2}=3,000$			
			$\delta_{(1)1}=\delta_{(2)1}=0$			
			$\gamma_{(1)1}=\gamma_{(2)1}=0$			

VIII. Összefoglalás

A magreakciók kapcsán megfigyelt rezonancia-jelenségek fizikai értelmezése és matematikai leírása között több évtizeden keresztül sajátos ellentmondás állt fenn. A rezonancia-jelenségek értelmezése fizikai *modellek alapján*, teljesen kvalitatív megfontolások segítségével történt. (Példaképpen elég, ha a Bohr-féle „compound mag” hipotézisre utalunk.) A rezonancia-jelenségek kvantitatív leírása viszont az általánosságra való törekvés jegyében, konkrét fizikai *modellektől függetlenül* történt. (Példaképpen elég, ha a Wigner-féle R -mátrix elméletre utalunk.) Az elmúlt évtizedek során jelentős fejlődés ment végbe mind a magfizikai modelleknek, mind pedig a magreakciók elméletének a tekintetében. Ezen párhuzamos fejlődés eredményeképpen megérték a feltételek ahhoz, hogy elérendő célként tűzzük ki a rezonancia-jelenségek fizikai értelmezése és kvantitatív leírása közötti összhang megteremtését. Ezen cél megközelítése érdekében

1. szükséges egy olyan, viszonylag jól megalapozott magreakció elmélet, amely matematikailag kezelhető és alkalmas a magmodellek által szolgáltatott információk „befogadására”;
2. szükségesek olyan magmodellek, amelyek egyrészt megbízható információkat szolgáltatnak a nukleáris rendszer strukturális és dinamikai tulajdonságaira vonatkozólag, másrészt matematikailag elég egyszerű formában szolgáltatják az információkat ahhoz, hogy azok beépíthetők legyenek egy magreakció elmélet keretei közé;

3. szükségesek olyan *egyszerű* rezonancia-jelenségekre vonatkozó kísérleti adatok és konkrét számítások, amelyek alkalmasak az elméleti leírás használhatóságának ellenőrzésére;
4. szükséges a rezonancia-jelenségeknek egy olyan exaktul megoldható modellje, amely alkalmas az elméleti leírás matematikai megbízhatóságának ellenőrzésére.

Ezen feladatok megoldása érdekében

1. A rugalmas nukleonszórás esetére korlátozódva, a Feshbach-féle projekciós operátorok felhasználásával kidolgoztuk a rezonanciaszórásnak egy meg lehetőségen flexibilis leírasmódját.
2. A héjmodell, illetve a kollektív modell mikroszkopikus változatának elemeit felhasználva, kidolgoztunk egy „gerjeszthető törzs + egy nukleon” jellegű modellt, amelynek alkalmazhatósági köre meglehetősen korlátozott ugyan, ezzel szemben elég természetes módon illeszkedik a nukleonszórás problémájához.
3. A kidolgozott leírasmód és a konkrét körülményekhez idomított modell alapján részletes számításokat végeztünk a ^{12}C atommagon történő rugalmas neutronszórásban jelentkező rezonanciák, illetve a ^{142}Nd atommagon történő rugalmas protonszórásban jelentkező izobár analóg rezonanciák leírására.
4. A reakció elméletben előforduló feltevések, illetve közelítések megbízhatóságának ellenőrzésére kidolgoztunk egy háromrészeske modellt, amely megoldható a reakció elméletben előforduló közelítések alkalmazása esetén is, de megoldható exaktul is a Feddeev módszer segítségével, ha nem-lokális, széparálható kölcsönhatási potenciálokat tételezünk fel.

Köszönetnyilvánítás

E helyen mondok köszönetet munkatársaimnak, *Beregi Péter*nek és *Révai János*-nak, akik munkájukkal aktívan hozzájárultak a dolgozatban tárgyalt problémák jelentős részének megoldásához.

IRODALOM

1. *H. Pose*, Zeit. für Physik, 64, 1, 1930.
2. *G. Breit* és *E. Wigner*, Phys. Rev. 49, 519, 1936.
3. *P. L. Kapur* és *R. Peierls*, Proc. Roy. Soc. (London) A166, 277, 1938.
4. *E. P. Wigner* és *L. Eisenbud*, Phys. Rev. 72, 29, 1947.
5. *J. Humblet* és *L. Rosenfeld*, Nucl. Phys. 26, 529, 1961.
6. *H. A. Weidenmüller*, Nucl. Phys. 75, 189, 1966.
7. *C. Bloch* és *V. Gillet*, Phys. Letters, 16, 62, 1965.
8. *H. Feshbach*, Ann. Phys. N. Y. 5, 357, 1958, 19, 287, 1962.
9. *V. M. Macdonald*, Nucl. Phys. 54, 393, 1964.
10. *T. Tamura*, Rev. Mod. Phys. 37, 679, 1965.
11. *A. K. Kerman*, *L. S. Rodberg* és *J. E. Young*, Phys. Rev. Lett. 11, 422, 1963.
12. *V. F. Weisskopf*, Physics Today, 14, 18, 1961.
13. *I. Lovas*, Proceedings of the Conference on Nuclear Reactions with Light Nuclei Rossendorf, 1967. p. 5.
14. *N. Bohr*, Nature 137, 344, 1936.

15. Marx Gy., Kvantummechanika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
16. B. A. Lippmann és J. Schwinger, Phys. Rev. 79, 469, 1950.
17. L. I. Schiff, Quantum mechanics, McGraw Hill, New York, 1955.
18. Sz. G. Mihlin, Integrálegyenletek és alkalmazásuk, Budapest, 1953.
19. L. D. Faddeev, ZSETF, 39 1459, 1960. Dokl. AN 138, 565, 1961. Dokl. AN 145, 301, 1962.
20. Kisdi D., ATOMKI Közl. 11, 47, 1969.
21. S. Weinberg, Phys. Rev. 133, B 232, 1964.
22. R. G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, McGraw-Hill, New York, 1966.
23. C. Lovelace, Phys. Rev. 135, B 1225, 1964.
24. W. Hunziker, Phys. Rev. 135, B 800, 1964.
25. O. A. Jakubovsky, Jadernaja Fiz. 8, 942, 1967.
26. A. M. Lane és R. G. Thomas, Rev. Mod. Phys. 30, 257, 1958.
27. C. Mahaux és H. A. Weidenmüller, Shell model approach to nuclear reactions. North-Holland, Amsterdam, 1969.
28. H. Feshbach, A. K. Kerman és R. H. Lemmer, Ann. of Phys. N. Y. 41, 41, 1967.
29. R. H. Lemmer és C. M. Shakin, Ann. of Phys. N. Y. 27, 13, 1964.
30. I. Lovas, Nucl. Phys. 81, 353, 1966.
31. J. J. Schmidt, KFK 120, 1962. Karlsruhe.
32. J. M. Blatt és V. F. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics, John Wiley and Sons, New York, 1952.
33. F. C. Barker, Nucl. Phys. 28, 96, 1961.
34. A. M. Lane, Rev. Mod. Phys. 32, 519, 1960.
35. A. M. Lane, R. G. Thomas és E. P. Wigner, Phys. Rev. 98, 693, 1955.
36. J. D. Anderson és C. Wong, Phys. Rev. Lett. 7, 250, 1961.
37. J. D. Fox, C. F. Moore és D. Robson, Phys. Rev. Lett. 12, 198, 1964.
38. J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny, W. W. True, Nuclear Isospin, Academic Press, New York, 1969.
39. J. M. Soper, Isospin in Nuclear Physics, North-Holland, Amsterdam, 1969, p. 229.
40. P. von Brentano, N. Marquardt, J. P. Wurm és S. A. A. Zaidi, Phys. Lett. 17, 124, 1965.
41. I. Lovas, Proc. Heidelberg Conf., 1966. p. 53.
42. P. Beregi és I. Lovas, Proc. Tokyo Conf. 1967, p. 325.
43. P. Beregi és I. Lovas, Nucl. Phys. A111, 289, 1968.
44. G. E. Brown, Unified Theory of Nuclear Models and Forces, North-Holland, Amsterdam, 1967.
45. P. Doleshall és I. Lovas, Phys. Lett. 21, 546, 1966.
46. G. Clausnitzer, R. Fleischmann, G. Graw, D. Proetel és J. P. Wurm, Proc. of Tokyo Conf., 1967, p. 329.
47. S. A. A. Zaidi, P. von Brentano, D. Riech és J. P. Wurm, Phys. Lett. 19, 45, 1965.
48. C. L. Nealy és R. K. Sheline, Phys. Rev. 155, 1314, 1967.
49. I. Lovas és J. Révai, Acta Phys. Hung. 25, 307, 1968.
50. P. Beregi, I. Lovas és J. Révai, Ann. of Phys. 61, 57, 1970.
51. P. Beregi és I. Lovas, Phys. Lett. 33B, 150, 1970.
52. P. Beregi és I. Lovas, Zeit. für Phys. 241, 410, 1971.
53. I. Lovas, Phys. Rev. (előkészületben.)
54. P. P. Delsanto, M. F. Roetter és H. G. Wahsweiler, Phys. Lett. 28B, 246, 1968.
55. V. V. Balashov, P. Doleschall, G. Ya. Korenman, V. L. Korotkih és V. N. Fetisov, Jagy. Fiz. 2, 461, 1965.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

AZ IMPULZUSMOMENTUMRÓL*

J. SCHWINGER

Tetszőleges impulzusmomentum-vektor felcserélési összefüggései visszavezethetők a harmonikus oszcillátor felcserélési összefüggéseire. Ez hatékony módszert ad kezünkbe az impulzusmomentum-sajátvektorok megszerkesztésére és tulajdonságaik kimunkálására. Ebben a dolgozatban sok ismert tételt vezetünk le ily módon és néhány új eredményt is kapunk. Egyebek között tárgyaljuk a forgásmátrixok tulajdonságait, továbbá két, három és négy impulzusmomentum összeadását, valamint a tenzoroperátorok elméletét.

1. Bevezetés

Az impulzusmomentum általános kvantummechanikai tárgyalásának egyik módja, hogy azt elemi „spinek” ($j = \frac{1}{2}$ impulzusmomentumok) szuperpozíciójának tekintjük. A spinek ilyen halmaza, melyet Bose—Einstein-rendszernek tekintünk, célszerűen tárgyalható a második kvantálás módszerével. Látni fogjuk, hogy ez az eljárás egyesíti a probléma csoportelméleti megközelítésének kompakt szimbolizmusát a kvantummechanika explicit operátor-módszerével.

Bevezetjük a spin keltő és elnyelő operátorait:

$$a_{\zeta}^{\pm} = (a_{+}^{\pm}, a_{-}^{\pm}) \quad \text{és} \quad a_{\zeta} = (a_{+}, a_{-}),$$

melyek adott térbeli koordinátarendszerhez tartoznak. Ezekre fennáll:

$$[a_{\zeta}, a_{\zeta'}] = 0, \quad [a_{\zeta}^{\pm}, a_{\zeta'}^{\pm}] = 0, \quad [a_{\zeta}, a_{\zeta'}^{\pm}] = \delta_{\zeta\zeta'}. \quad (1.1)$$

A spinek számát és az eredő impulzusmomentumot az

$$n = \sum_{\zeta} a_{\zeta}^{\dagger} a_{\zeta} = n_{+} + n_{-}, \quad \mathbf{I} = \sum_{\zeta, \zeta'} a_{\zeta}^{\dagger} (\boldsymbol{\zeta} | \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} | \zeta') a_{\zeta'} \quad (1.2)$$

képletek adják meg. A \mathbf{I} impulzusmomentum komponensei, $\boldsymbol{\sigma}$ megszokott mátrix-előállításának használata mellett, a következő alakúak:

$$I_{+} = I_1 + iI_2 = a_{+}^{\dagger} a_{-}, \quad I_{-} = I_1 - iI_2 = a_{-}^{\dagger} a_{+}, \quad (1.3)$$

$$I_3 = \frac{1}{2}(a_{+}^{\dagger} a_{+} - a_{-}^{\dagger} a_{-}) = \frac{1}{2}(n_{+} - n_{-}).$$

Az impulzusmomentum felcserélési tulajdonságainak ezen realizációja, mely a harmonikus oszcillátor operátorainak tulajdonságain alapszik, bevezethető természetesen anélkül is, hogy a spinek összetevésére explicite hivatkoznánk.

* U. S. Atom. Energy Comm. NYO—3071, 1952.

A teljes impulzusmomentum

$$\mathbf{I}^2 = \sum_{\zeta, \zeta', \zeta''} a_{\zeta}^{\dagger} a_{\zeta'} a_{\zeta''}^{\dagger} a_{\zeta'''} (\zeta | \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} | \zeta') \cdot (\zeta'' | \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} | \zeta''') \quad (1.4)$$

négyzetének kiszámításához felhasználjuk a spinek

$$P^{(12)} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}) \quad (1.5)$$

permutációs operátorának mátrixelemeit. Eszerint

$$(\zeta | \boldsymbol{\sigma} | \zeta') \cdot (\zeta'' | \boldsymbol{\sigma} | \zeta''') = 2\delta_{\zeta\zeta''} \delta_{\zeta'\zeta'''} - \delta_{\zeta\zeta'} \delta_{\zeta''\zeta'''} \quad (1.6)$$

és

$$\mathbf{I}^2 = \frac{1}{2} \sum_{\zeta, \zeta'} a_{\zeta}^{\dagger} a_{\zeta'} a_{\zeta'}^{\dagger} a_{\zeta} - \frac{1}{4} n^2. \quad (1.7)$$

Az (1.1) felcserélési összefüggések értelmében

$$\sum_{\zeta, \zeta'} a_{\zeta}^{\dagger} a_{\zeta'} a_{\zeta'}^{\dagger} a_{\zeta} = \sum_{\zeta} a_{\zeta}^{\dagger} (n+2) a_{\zeta} = n(n+1), \quad (1.8)$$

és így

$$\mathbf{I}^2 = \frac{1}{2} n(\frac{1}{2} n + 1) \quad (1.9)$$

adott $n=0, 1, 2, \dots$ számú spinhez eszerint meghatározott

$$j = \frac{1}{2} n = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (1.10)$$

impulzusmomentum-kvantumszám tartozik.

Megjegyezzük továbbá, hogy (1.3) szerint az olyan állapot, amelyben a pozitív és a negatív spinek száma rögzített érték, egyszersmind meghatározott mágneses kvantumszámmal jellemezhető,

$$m = \frac{1}{2}(n_+ - n_-), \quad j = \frac{1}{2}(n_+ + n_-). \quad (1.11)$$

A betöltési számok adott értékével jellemzett állapot

$$\Psi(n_+ n_-) = \frac{(a_+^{\dagger})^{n_+} (a_-^{\dagger})^{n_-}}{(n_+!)^{\frac{1}{2}} (n_-!)^{\frac{1}{2}}} \Psi_0 \quad (1.12)$$

$(a_{\pm} \Psi_0 = 0)$ sajátvektorából ennél fogva a

$$\Psi(jm) = \frac{(a_+^{\dagger})^{j+m} (a_-^{\dagger})^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{\frac{1}{2}}} \Psi_0 \quad (1.13)$$

impulzusmomentum-sajátvektort kapjuk.¹ Ez az alak jól ismert, mint az impulzusmomentum-sajátvektorok transzformációs tulajdonságainak szimbolikus kifejezője²; itt azonban, mint a sajátvektor precíz operátor-konstrukciója jelenik meg előttünk.

¹ Ennek közvetlen bizonyítását az A. Függelékben adjuk meg.

² Lásd pl. H. Weyl, „The Theory of Groups and Quantum Mechanics” (E. P. Dutton and Company, Inc., New York, 1931), 189. old.

Megszorozva (1.13)-at az $x_\zeta = (x_+, x_-)$ tetszőleges spinor komponenseiből megszerkesztett analóg

$$\varphi_{jm}(x) = \frac{x_+^{j+m} x_-^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{\frac{1}{2}}} \quad (1.14)$$

monommal, m -re, majd pedig j -re összegezve kapjuk:

$$\sum_{m=-j}^j \varphi_{jm}(x) \Psi(jm) = \frac{(xa^+)^{2j}}{(2j)!} \Psi_0, \quad (1.15)$$

valamint

$$\sum_{jm} \varphi_{jm}(x) \Psi(jm) = e^{(xa^+)} \Psi_0; \quad (1.16)$$

itt az

$$(xa^+) = \sum_{\zeta} x_{\zeta} a_{\zeta}^+ \quad (1.17)$$

jelölést alkalmaztuk. Az (1.16) kifejezés, mint sajátvektor-generátorfüggvény hasznosságának illusztrálására igazoljuk az (1.13) sajátvektorok ortogonalitását és normáltságát. Vegyük szemügyre az

$$\begin{aligned} (e^{(xa^+)} \Psi_0, e^{(ya^+)} \Psi_0) &= \sum \varphi_{jm}(x^*) (\Psi(jm), \Psi(j'm')) \varphi_{j'm'}(y) = \\ &= (\Psi_0, e^{(x^*a)} e^{(ya^+)} \Psi_0) \end{aligned} \quad (1.18)$$

skalárszorzatot. Az (1.1) felcserélési összefüggések és $a_{\zeta} \Psi_0 = 0$ értelmében kapjuk:

$$a_{\zeta} f(a^+) \Psi_0 = \left(\frac{\partial f(a^+)}{\partial a_{\zeta}^+} \right) \Psi_0; \quad (1.19)$$

innen következik:

$$(\Psi_0, e^{(x^*a)} e^{(ya^+)} \Psi_0) = e^{(x^*y)} (e^{(y^*a)} \Psi_0, \Psi_0) = e^{(x^*y)} = \sum_{jm} \varphi_{jm}(x^*) \varphi_{jm}(y). \quad (1.20)$$

Bebizonyítottuk tehát, hogy

$$(\Psi(jm), \Psi(j'm')) = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (1.21)$$

Másik elemi példaként meg fogjuk kapni I_{\pm} hatványainak mátrixelemeit, szemügyre véve az $e^{\lambda I_{\pm}}$ operátoroknak az (1.16) egyenletre gyakorolt hatását:

$$\begin{aligned} \sum_{jm} \varphi_{jm}(x) e^{\lambda I_+} \Psi(jm) &= e^{\lambda a_+^+ a_-} e^{(xa^+)} \Psi_0 = e^{\lambda x_- a_+^+} e^{(xa^+)} \Psi_0 = \\ &= e^{(x_+ + \lambda x_-) a_+^+ + x_- a_-^+} \Psi_0 = \\ &= \sum_{jm} \varphi_{jm}(x_+ + \lambda x_-, x_-) \Psi(jm), \end{aligned} \quad (1.22)$$

így tehát

$$\sum_{j'm'} (jm | e^{\lambda I_+} | j'm') \varphi_{j'm'}(x) = \varphi_{jm}(x_+ + \lambda x_-, x_-). \quad (1.23)$$

Ezt kifejtve az el nem tűnő mátrixelemek számára a következő kifejezést kapjuk:

$$(jm | I_+^{m-m'} | jm') = \left[\frac{(j+m)!}{(j+m')!} \frac{(j-m')!}{(j-m)!} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad m-m' > 0. \quad (1.24)$$

Hasonlóan

$$\sum_{j'm'} (jm|e^{\lambda I_-}|j'm') \varphi_{j'm'}(x) = \varphi_{jm}(x_+, x_- + \lambda x_+), \quad (1.25)$$

$$(jm|I_-^{m'-m}|jm') = \left[\frac{(j+m')!}{(j+m)!} \frac{(j-m)!}{(j-m')!} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad m'-m > 0. \quad (1.26)$$

Az (1.24), (1.26) képletekből speciálisan következik:

$$\begin{aligned} \Psi(jm) &= \left[\frac{1}{(2j)!} \frac{(j-m)!}{(j+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot I_+^{j+m} \Psi(j, -j) \\ &= \left[\frac{1}{(2j)!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot I_-^{j-m} \Psi(j, j). \end{aligned} \quad (1.27)$$

Ezek a képletek pontosan megmutatják, miképpen szerkeszthető meg a $\Psi(jm)$ tetszőleges sajátvektor azon sajátvektorokból kiindulva, amelyek $|m|$ -nek az adott j -vel összeférő maximális értékéhez tartoznak.

Megadható egy olyan operátor is, amely lehetővé teszi tetszőleges sajátvektor megszerkesztését, kiindulva abból a sajátvektorból, amelyet j -nek az adott m -mel összeférő minimális értéke jellemez. Valóban, ha (1.13)-at a

$$\Psi(jm) = \frac{(a_+^\dagger a_+^\dagger)^{|j-|m||}}{[(j+|m|)!(j-|m|)!]^{\frac{1}{2}}} (a_+^\dagger)^{|m|+m} (a_-^\dagger)^{|m|-m} \Psi_0 \quad (1.28)$$

alakban írjuk fel, úgy ez a képlet azt mondja, hogy

$$\Psi(jm) = \left[\frac{(2|m|)!}{(j+|m|)!(j-|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} K_+^{j-|m|} \Psi(|m|, m); \quad (1.29)$$

itt a K_+ (és ezzel együtt a K_- és a K_3) operátort

$$K_+ = a_+^\dagger a_+^\dagger, \quad K_- = a_- a_-, \quad (1.30)$$

definiálja. Könnyű belátni, hogy

$$[I_3, K_\pm] = [I_3, K_3] = 0, \quad (1.31)$$

és

$$[K_3, K_+] = K_+, \quad [K_3, K_-] = -K_-, \quad [K_+, K_-] = -2K_3. \quad (1.32)$$

Az utóbbi felcserélési összefüggések analógiát mutatnak a I operátorok felcserélési összefüggéseivel, eltekintve a $[K_+, K_-]$ kommutátor előjelétől. Ennek az analógiának megfelelően kapjuk a

$$I_3^2 - \frac{1}{4} = K_3(K_3 - 1) - K_+ K_- = K_3(K_3 + 1) - K_- K_+ \quad (1.33)$$

összefüggést, mely a

$$I^2 = I_3(I_3 - 1) + I_+ I_- = I_3(I_3 + 1) + I_- I_+ \quad (1.34)$$

egyenlettel állítható párhuzamba. Ha megjegyezzük, hogy K_3 sajátértéke $j + \frac{1}{2}$,

látjuk: K -ban j és m szerepe lényegében felcserélődik. Eszerint azon tér hiperbolikus jellege, amelyben a K operátorok hatnak, az $|m| \leq j$ korlátozással áll kapcsolatban.

Szorozzuk meg (1.29)-et egy hasonló numerikus kifejezéssel, azután összegezzük j -re; így módon kapjuk:

$$\sum_{j=|m|}^{\infty} \left[\frac{(2|m|)!}{(j+|m|)!(j-|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \lambda^{j-|m|} \Psi(jm) = F_{2|m|}(\lambda K_+) \Psi(|m|, m), \quad (1.35)$$

ahol

$$F_r(z) = r! z^{-r/2} I_r(2z^{1/2}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r!}{n!(r+n)!} z^n, \quad (1.36)$$

I_r pedig a képzetes argumentumú hengerfüggvény. Egyszerűbb generátorfüggvényt ad meg a

$$\sum_j \left[\frac{1}{(2|m|)!} \frac{(j+|m|)!}{(j-|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \lambda^{j-|m|} \Psi(jm) = e^{\lambda K_+} \Psi(|m|, m) \quad (1.37)$$

képlet.

2. Elforgatások

Az (1.15) képlet nevezetes értelmezését nyerjük, ha bevezetjük az

$$\begin{aligned} a'^+ &= (xa^+), & a'_+ &= (x^*a), \\ a'^- &= [x^*a^+], & a'_- &= [xa] \end{aligned} \quad (2.1)$$

operátorokat, ahol

$$[xy] = x_+ y_- - x_- y_+. \quad (2.2)$$

Az

$$(x^*x) = 1 \quad (2.3)$$

megszorítás mellett ezek az operátorok ugyancsak eleget tesznek az (1.1) felcserélési összefüggéseknek; azoknak tehát szintén spin-keltő és -elnyelő operátoroknak kell lenniük, melyek egy másik térbeli vonatkoztatási rendszerhez tartoznak. Ennek megfelelően (1.15) az $m=j$ állapot reprezentánsának tekinthető az elforgatott koordináta-rendszerben, a fix koordináta-rendszerbeli sajátvektorok lineáris kombinációja alakjában kifejezve:

$$\Psi'(jj) = \frac{(a'^+)^{2j}}{((2j)!)^{\frac{1}{2}}} \Psi_0 = ((2j)!)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=-j}^j \varphi_{jm}(x) \Psi(jm). \quad (2.4)$$

E transzformáció unitér volta könnyen igazolható:

$$(2j)! \sum_m \varphi_{jm}(x^*) \varphi_{jm}(x) = (x^*x)^{2j} = 1. \quad (2.5)$$

Általában

$$\Psi'(jm') = \varphi_{jm'}(a'^+) \Psi_0 = \sum_m \Psi(jm) U_{mm'}^{(j)}; \quad (2.6)$$

az együtthatókat a

$$\sum_m \varphi_{jm}(a^+) U_{mm'}^{(j)} = \varphi_{jm'}(x_+ a_+^+ + x_- a_-^+, -x_-^* a_+^+ + x_+^* a_-^+) \quad (2.7)$$

képletből olvashatjuk ki.

Hasznos bevezetni azt az unitér operátort, amely $\Psi(jm)$ -ből előállítja $\Psi'(jm')$ -t:

$$\Psi'(jm') = U\Psi(jm); \quad (2.8)$$

ez lehetővé teszi a (2.6) képletben fellépő együtthatók alternatív megszerkesztését:

$$U_{mm'}^{(j)} = (jm|U|jm'). \quad (2.9)$$

A φ, ϑ, ψ Euler-szögekkel jellemzett, egymást követően végrehajtott elforgatások segítségével U explicite megadható:

$$U = e^{-i\psi I_3''} e^{-i\vartheta I_2'} e^{-i\varphi I_3}, \quad (2.10)$$

ahol

$$\begin{aligned} I' &= e^{-i\varphi I_3} I e^{i\varphi I_3}, \\ I'' &= e^{-i\vartheta I_2} I' e^{i\vartheta I_2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

az előző elforgatások szolgáltatja koordinátarendszereknek megfelelő operátorok. Eredményül $U(\varphi\vartheta\psi)$ számára a következő kifejezést kapjuk:

$$U = e^{-i\varphi I_3} e^{-i\vartheta I_2} e^{-i\psi I_3}, \quad U^{-1} = e^{i\psi I_3} e^{i\vartheta I_2} e^{i\varphi I_3}. \quad (2.12)$$

Az új koordinátarendszernek megfelelő

$$I' = UIU^{-1} \quad (2.13)$$

impulzuszómomentum-operátorokat megszerkeszthetjük a transzformált keltő és elnyelő operátorokból:

$$\begin{aligned} a_+^{\prime+} &= Ua_+^+ U^{-1} = e^{-(i/2)(\psi+\varphi)} \cos \frac{1}{2}\vartheta a_+^+ + e^{-(i/2)(\psi-\varphi)} \sin \frac{1}{2}\vartheta a_-^+, \\ a_-^{\prime+} &= Ua_-^+ U^{-1} = -e^{-(i/2)(\psi-\varphi)} \sin \frac{1}{2}\vartheta a_+^+ + e^{(i/2)(\psi+\varphi)} \cos \frac{1}{2}\vartheta a_-^+. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A (2.14) képletben az átalakítást az

$$\begin{aligned} e^{-i\psi I_3} a_{\pm}^{\pm} e^{i\psi I_3} &= e^{\mp(i/2)\psi} a_{\pm}^{\pm}, \\ e^{-i\vartheta I_2} a_{\pm}^{\pm} e^{i\vartheta I_2} &= \cos \frac{1}{2}\vartheta a_{\pm}^{\pm} \pm \sin \frac{1}{2}\vartheta a_{\mp}^{\pm} \end{aligned} \quad (2.15)$$

képletek felhasználásával végeztük el. Ezek közül az első közvetlenül következik a_{\pm}^{\pm} -nak, mint a pozitív, ill. negatív spinű keltő operátorának jelentéséből; a második pedig ϑ szerint elvégzett differenciálással, valamint az

$$[a_{\pm}^{\pm}, I_2] = \mp(i/2)a_{\pm}^{\pm} \quad (2.16)$$

felcserélési összefüggést tekintetbe véve igazolható. A (2.14) alak (2.1) és (2.3) specializálása az

$$x_+ = e^{-(i/2)(\psi+\varphi)} \cos \frac{1}{2}\vartheta, \quad x_- = e^{-(i/2)(\psi-\varphi)} \sin \frac{1}{2}\vartheta \quad (2.17)$$

értékek választása mellett.

Az U mátrix megszerkesztése céljából vegyük szemügyre az

$$(\varphi^{(xa+)} \Psi_0, Ue^{(ya+)} \Psi_0) = \sum_{jm} \varphi_{jm}(x^*) U_{mm'}^{(j)} \varphi_{jm'}(y) = (\Psi_0, e^{(x^*a)} e^{(ya'+)} \Psi_0) \quad (2.18)$$

kifejezést; itt a'^{+} a (2.14) operátorokat jelenti. Írjuk

$$(ya'^{+}) = (a^{+}uy), \quad (2.19)$$

ahol

$$u = \begin{pmatrix} e^{-(i/2)(\varphi+\psi)} \cos \frac{1}{2} \vartheta & -e^{-(i/2)(\varphi-\psi)} \sin \frac{1}{2} \vartheta \\ e^{-(i/2)(\varphi-\psi)} \sin \frac{1}{2} \vartheta & e^{(i/2)(\varphi+\psi)} \cos \frac{1}{2} \vartheta \end{pmatrix}; \quad (2.20)$$

közvetlenül kapjuk:

$$\sum_{jm} \varphi_{jm}(x^*) U_{mm'}^{(j)} \varphi_{jm'}(y) = e^{(x^*uy)}. \quad (2.21)$$

Míthogy (2.12) értelmében

$$U_{mm'}^{(j)}(\varphi\vartheta\psi) = e^{-im\varphi} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) e^{-im'\psi}, \quad (2.22)$$

ahol

$$U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) = (jm|e^{-i\vartheta I_z}|jm'), \quad (2.23)$$

a (2.21) kifejezést egyszerűsíthetjük, behelyettesítve a $\varphi = \psi = 0$ értékeket; ily módon kapjuk:

$$\sum_{jm} \varphi_{jm}(x^*) U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) \varphi_{jm'}(y) = \exp \{ \cos \frac{1}{2} \vartheta (x^*y) - \sin \frac{1}{2} \vartheta [x^*y] \}. \quad (2.24)$$

Az u mátrix unitér és unimoduláris, azaz determinánsa 1. A spinmátrixok segítségével u a (2.12) alakban állítható elő:

$$u = e^{-(i/2)\varphi\sigma_3} e^{-(i/2)\vartheta\sigma_2} e^{-(i/2)\psi\sigma_3}, \quad (2.25)$$

amint annak lennie is kell. Minden ilyen unitér mátrixot előállíthatunk az

$$u = e^{-i\mathcal{H}} \quad (2.26)$$

alakban, ahol \mathcal{H} hermitikus mátrix. Míthogy

$$\det u = e^{-i \operatorname{tr} \mathcal{H}}, \quad (2.27)$$

\mathcal{H} -nak zérus átlósösszegű hermitikus mátrixnak kell lennie; az tehát a spinmátrixok valós együtthatójú lineáris kombinációja. Eszerint u így írható:

$$u = e^{-(i/2)\gamma \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}, \quad (2.28)$$

ahol \mathbf{n} egységvektor, mely két szöggel, α -val és β -val jellemezhető. Az a tény, hogy (2.28) az \mathbf{n} tengely körül végrehajtott γ szögű elforgatást leíró mátrix, mutatja a jól ismert ekvivalenciát egy tetszőleges elforgatás, valamint egy alkalmasan választott tengely körül végrehajtott egyszerű elforgatás között. A γ forgási szöveget könnyen megkaphatjuk, összehasonlítva u -nak a két változatban kiszámított átlósösszegét:

$$\frac{1}{2} \operatorname{tr} u = \cos \frac{1}{2} \gamma = \cos \frac{1}{2} \vartheta \cos \frac{1}{2} (\varphi + \psi). \quad (2.29)$$

Általánosabban, U átlósösszege adott j mellett csak az elforgatás γ szögétől függ. Legyen³

$$\chi^{(j)} = \sum_{m=-j}^j U_{mm}^{(j)} = \operatorname{tr} P_j U, \quad (2.30)$$

³ Ennek az átlósösszegnek a csoportelméletben karakter a neve.

ahol P_j a j kvantumszámmal jellemzett állapotok projekciós operátora. Megjegyezve, hogy U -t is elő kell tudnunk állítani a (2.28) alakban:

$$U = e^{-i\gamma \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}}, \quad (2.31)$$

közvetlenül kapjuk:

$$\chi^{(j)} = \sum_{m=-j}^j e^{-im\gamma} = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\gamma}{\sin \frac{1}{2}\gamma}. \quad (2.32)$$

Ezt mindazonáltal a (2.21) generátorfüggvényből közvetlenül is lezármasztathatjuk.

Az egyszerűség kedvéért fel fogjuk tenni, hogy a koordináta-rendszer megfelelő választása folytán u átlós mátrix, az $e^{\pm(i/2)\gamma}$ sajátértékekkel. Az x_ξ^* változót $t(\partial/\partial y_\xi)$ -val helyettesítjük s a deriváltaknak az $y_\xi = 0$ helyen számítjuk ki. Minthogy

$$\varphi_{jm}(\partial/\partial y) \varphi_{jm'}(y)|_{y_\xi=0} = \delta_{m,m'}, \quad (2.33)$$

kapjuk:

$$\sum_j t^{2j} \chi^{(j)} = \exp\left(te^{-(i/2)\gamma} \frac{\partial}{\partial y_+}; y_+\right) \cdot \exp\left(te^{(i/2)\gamma} \frac{\partial}{\partial y_-}; y_-\right) \Big|_{y_\xi=0}, \quad (2.34)$$

itt a jelölés kifejezi annak szükségességét, hogy a $\partial/\partial y$ szimbólumok y_ξ hatványaitól balra álljanak. Fennáll:

$$\exp\left(\lambda \frac{\partial}{\partial y}; y\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^n y^n = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n = \frac{1}{1-\lambda}; \quad (2.35)$$

így tehát

$$\begin{aligned} \sum_j t^{2j} \chi^{(j)} &= \frac{1}{1-t \cdot \exp\left(-\frac{i}{2}\gamma\right)} \frac{1}{1-t \cdot \exp\left(\frac{i}{2}\gamma\right)} \\ &= \frac{1}{1-2t \cdot \cos \frac{1}{2}\gamma + t^2}; \end{aligned} \quad (2.36)$$

ez a $\chi^{(j)}$ -k generátorfüggvénye. Az

$$\begin{aligned} &\frac{1}{1-t \cdot \exp\left(-\frac{i}{2}\gamma\right)} \frac{1}{1-t \cdot \exp\left(\frac{i}{2}\gamma\right)} = \\ &= \frac{1}{2it \cdot \sin \frac{1}{2}\gamma} \left[\frac{1}{1-t \cdot \exp\left(\frac{i}{2}\gamma\right)} - \frac{1}{1-t \cdot \exp\left(-\frac{i}{2}\gamma\right)} \right] \end{aligned} \quad (2.37)$$

kifejezést t hatványai szerint kifejtve kapjuk:

$$\chi^{(j)}(\gamma) = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\gamma}{\sin \frac{1}{2}\gamma}. \quad (2.38)$$

Az $U_{mm}^{(j)}(\varphi \partial \psi)$ mátrix szimmetriatulajdonságait könnyen megállapíthatjuk

(2.21) alapján. Az (x^*uy) kifejezésnek a $\varphi \leftrightarrow \psi + \pi$, $x^* \leftrightarrow y$, és $\varphi \rightarrow \varphi - \pi$, $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$, $\psi \rightarrow -\psi$, $y_{\pm} \rightarrow iy_{\mp}$ helyettesítésekkel szemben mutatott invarianciája alapján kapjuk:

$$U_{mm'}^{(j)}(\varphi\vartheta\psi) = U_{m'm}^{(j)}(\psi + \pi, \vartheta, \varphi - \pi) = i^{2j} U_{m, -m'}^{(j)}(\varphi - \pi, \pi - \vartheta, -\psi), \quad (2.39)$$

A további ekvivalens alakok, melyeket ezen transzformációk egymást követő alkalmazása eredményez:

$$\begin{aligned} i^{2j} U_{mm'}^{(j)}(-\varphi, \pi - \vartheta, \psi + \pi) &= U_{-m, -m'}^{(j)}(\pi - \varphi, \vartheta, -\pi - \psi) = \\ &= U_{-m', -m}^{(j)}(-\psi, \vartheta, -\varphi). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Megjegyezzük ezen kívül, hogy

$$U_{mm'}^{(j)*}(\varphi\vartheta\psi) = U_{mm'}^{(j)}(-\varphi, \vartheta, -\psi) = U_{-m, -m'}^{(j)}(\varphi + \pi, \vartheta, \psi - \pi). \quad (2.41)$$

A φ és ψ szögeket (2.22) segítségével eltávolítva azt találjuk, hogy (2.39) és (2.40) tartalmát kifejezik az

$$\begin{aligned} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) &= (-1)^{j-m} U_{m-m'}^{(j)}(\pi - \varphi) = (-1)^{j-m'} U_{-mm'}^{(j)}(\pi - \vartheta) = \\ &= (-1)^{m-m'} U_{-m, -m'}^{(j)}(\vartheta) = (-1)^{m-m'} U_{m'm}^{(j)}(\vartheta) = U_{-m', -m}^{(j)}(\vartheta) \end{aligned} \quad (2.42)$$

egyenletek. Tekintettel ezekre az összefüggésekre elegendő, ha $U_{mm'}^{(j)}(\vartheta)$ -t m és m' nemnegatív értékeire adjuk meg.

A (2.24) generátorfüggvényt $\varphi_{jm}(x^*)$ vagy $\varphi_{jm'}(y)$ segítségével előállítva a következő ekvivalens kifejezéseket kapjuk:

$$\sum_{m'} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) \varphi_{jm'}(y) = \varphi_{jm}(\cos \frac{1}{2} \vartheta y_+ - \sin \frac{1}{2} \vartheta y_-, \sin \frac{1}{2} \vartheta y_+ + \cos \frac{1}{2} \vartheta y_-), \quad (2.43a)$$

$$\sum_m \varphi_{jm}(x^*) U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) = \varphi_{jm'}(\cos \frac{1}{2} \vartheta x_+^* + \sin \frac{1}{2} \vartheta x_-^*, -\sin \frac{1}{2} \vartheta x_+^* + \cos \frac{1}{2} \vartheta x_-^*). \quad (2.43b)$$

Ezek közül az utóbbi (2.7) megfelelője. Az $U_{mm'}^{(j)}(\vartheta)$ mátrix célszerűen megszerkeszthető az

$$x_+^* = \sin \frac{1}{2} \vartheta \cos \frac{1}{2} \vartheta, \quad x_-^* = t - \cos^2 \frac{1}{2} \vartheta$$

értékek behelyettesítésével; (2.43b) ekkor a

$$\begin{aligned} &\sum_m \frac{(\sin \frac{1}{2} \vartheta \cos \frac{1}{2} \vartheta)^{j+m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{\frac{1}{2}}} (t - \cos^2 \frac{1}{2} \vartheta)^{j-m} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) = \\ &= (-1)^{j-m'} \left[\frac{(\sin \frac{1}{2} \vartheta)^{j+m} (\cos \frac{1}{2} \vartheta)^{j-m'}}{[(j+m')!(j-m')!]^{\frac{1}{2}}} \right] t^{j+m'} (1-t)^{j-m'} \end{aligned} \quad (2.44)$$

alakot ölti. Így tehát

$$\begin{aligned} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) &= (-1)^{j-m'} \left[\frac{(j+m)!}{(j-m)!(j+m')!(j-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} [(\sin \frac{1}{2} \vartheta)^{-m+m'} (\cos \frac{1}{2} \vartheta)^{-m-m'}] \cdot \\ &\cdot \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^{j-m} t^{j+m'} (1-t)^{j-m'} \right]_{t=\cos^2 \frac{1}{2} \vartheta}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

A jobboldalon álló kifejezés a Jacobi-polinomok szerkezetét mutatja:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_n(a, b; t) &= F(-n, a+n, b; t) = \\ &= \frac{(b-1)!}{(b+n-1)!} t^{1-b} (1-t)^{b-a} \left(\frac{d}{dt} \right)^n t^{b+n-1} (1-t)^{a-b+n},\end{aligned}\quad (2.46)$$

ennélfogva írható:⁴

$$\begin{aligned}U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) &= \frac{(-1)^{j-m'}}{(m+m')!} \left[\frac{(j+m)! (j+m')!}{(j-m)! (j-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} (\sin \tfrac{1}{2} \vartheta)^{m-m'} (\cos \tfrac{1}{2} \vartheta)^{m+m'} \cdot \\ &\cdot \mathcal{F}_{j-m}(2m+1, m+m'+1; \cos^2 \tfrac{1}{2} \vartheta).\end{aligned}\quad (2.47)$$

További alakokat is kaphatunk (2.43)-ból, melyek a hipergeometrikus függvényekre alkalmazható különféle transzformációknak felelnek meg. Az ismert

$$F(a, b, c; x) = (1-x)^{-a} F\left(a, c-b, c; -\frac{x}{1-x}\right) \quad (2.48)$$

relációt alkalmazva (2.47)-re kapjuk:

$$\begin{aligned}U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) &= \frac{(-1)^{j-m'}}{(m+m')!} \left[\frac{(j+m)! (j+m')!}{(j-m)! (j-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} (\sin \tfrac{1}{2} \vartheta)^{2j} (\cot \tfrac{1}{2} \vartheta)^{m+m'} \cdot \\ &\cdot F(m-j, m'-j, m+m'+1; -\cot^2 \tfrac{1}{2} \vartheta).\end{aligned}\quad (2.49)$$

A vonatkoztatási rendszer transzformációjának egy további vonatkozása előnyösen tárgyalható az

$$U_{mm'}^{(j)*}(\varphi \vartheta \psi) = e^{im\varphi} U_{mm'}^{(j)}(\vartheta) e^{im'\psi} = (jm' | U^{-1} | jm) \quad (2.50)$$

mennyiségből kiindulva. Ez nem más, mint a

$$(\Psi'(jm'), \Psi(jm)) = (\omega, jm' | jm) \quad (2.51)$$

transzformációs függvény; itt ω a régi és az új vonatkoztatási rendszer kapcsolatát jellemző $\varphi \vartheta \psi$ szögeket jelöli összefoglaló módon. E transzformációs függvény Euler-szögektől való függésének differenciális jellemzésével kívánunk foglalkozni. Fennáll:

$$\begin{aligned}\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} U^{-1} &= U^{-1} I_3, \\ \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} U^{-1} &= I_3 U^{-1} = U^{-1} I_3', \\ \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vartheta} U^{-1} &= U^{-1} e^{-i\varphi I_3} I_2 e^{i\varphi I_3} = U^{-1} I_3,\end{aligned}\quad (2.52)$$

⁴ Ez ekvivalens P. Güttinger, *Z. Phys.* **73**, 169 (1931), eredményével.

ahol

$$I'_3 = I_3 \cos \vartheta + \frac{1}{2} \sin \vartheta (I_+ e^{-i\varphi} + I_- e^{i\varphi}), \quad (2.53)$$

$$I_\vartheta = \frac{1}{2i} (I_+ e^{-i\varphi} - I_- e^{i\varphi}),$$

s ennélfogva

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\omega) = (\omega | I_3),$$

$$e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin \vartheta} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} - \cos \vartheta \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] (\omega) = (\omega | I_+), \quad (2.54)$$

$$e^{-i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin \vartheta} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} - \cos \vartheta \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] (\omega) = (\omega | I_-).$$

Tetszőleges impulzusmomentum-vektor differenciáloperátorok segítségével való előállítását nyertük. A pályaimpulzusmomentum jól ismert differenciáloperátorait akkor kapjuk meg, ha a transzformációs függvény független ψ -től. Minthogy ez $m'=0$ -nak felel meg, a j kvantumszámnak ekkor egész számnak kell lennie.⁵

A (2.54) differenciáloperátorok jól ismertek a merev test impulzusmomentumával kapcsolatban, s ennek megfelelően I^2 sajátértékegyenlete — ebben a reprezentációban — megegyezik a szimmetrikus pörgettyű hullámegyenletével. Ezen egyenlet közvetlen megszerkesztése céljából megjegyezzük, hogy

$$\begin{aligned} I^2 &= I_3^2 + (\tfrac{1}{2} I_+ e^{-i\varphi} + \tfrac{1}{2} I_- e^{i\varphi})^2 - (\tfrac{1}{2} I_+ e^{-i\varphi} - \tfrac{1}{2} I_- e^{i\varphi})^2 = \\ &= I_3^2 + \left[\frac{I'_3 - I_3 \cos \vartheta}{\sin \vartheta} \right]^2 + I_\vartheta^2 = \\ &= \frac{I_3^2 - 2I'_3 I_3 \cos \vartheta + I_3^2}{\sin^2 \vartheta} + I_\vartheta^2 + \cot \vartheta \frac{1}{i} I_\vartheta, \end{aligned} \quad (2.55)$$

minthogy

$$[I'_3, I_3] = \sin \vartheta \frac{1}{i} I_\vartheta. \quad (2.56)$$

A (2.52) egyenletek segítségével nyomban kapjuk:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \psi^2} - 2 \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \psi} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] U^{-1} = U^{-1} I^2; \quad (2.57)$$

megkapjuk továbbá az (ω) -ra vonatkozó differenciálegyenletet (sajátértékegyenletet):

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + j(j+1) - \frac{m^2 - 2mm' \cos \vartheta + m'^2}{\sin^2 \vartheta} \right] (\omega, jm' | jm) = 0. \quad (2.58)$$

⁵ Azt a felismerést, hogy a (2.54) alatt felírt általános differenciáloperátorok j számára megengednek fél-egész értékeket, tartalmazza F. Bopp és R. Haag dolgozata, *Z. Naturforsch.* **5a**, 644 (1950).

Egy integráltétel, mely U vagy U^{-1} szögfüggésére vonatkozik:

$$\int U d\omega = P_0, \quad (2.59)$$

ahol P_0 a $j=0$ állapot projekciós operátora, és

$$d\omega = \frac{1}{2} \sin \vartheta \cdot d\vartheta \cdot \frac{1}{4\pi} d\varphi \cdot \frac{1}{4\pi} d\psi, \quad (2.60)$$

$$\int d\omega = 1.$$

Az integrációs tartomány;

$$0 \leq \varphi < 4\pi, \quad 0 \leq \psi < 4\pi, \quad 0 \leq \vartheta \leq \pi. \quad (2.61)$$

Ezen tétel igazolása céljából végezzük el (2.57) alatt a $d\omega$ -ban foglalt szögekre vonatkozó integrálást. Tekintettel U^{-1} -nek a φ és ψ változók 4π hosszúságú intervallumain mutatott periodicitására, kapjuk:

$$\int U^{-1} d\omega I^2 = -\frac{1}{2} \left[\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \int U^{-1} \frac{d\varphi}{4\pi} \frac{d\psi}{4\pi} \right]_{\vartheta=0}^{\pi} = 0. \quad (2.62)$$

Ez az eredmény mutatja, hogy $\int U^{-1} d\omega$ és annak $\int U d\omega$ hermitikus konjugáltja eltűnik, a $j=0$ állapotot kivéve. Az a tény, hogy a forgásoperátor ezen gömbszimmetrikus állapot esetében egyenlő eggyel, teljessé teszi (2.59) bizonyítását. Ezen tétel alkalmazására a következő szakaszban kerül sor.

3. Két impulzuszórázat összeadása

Két kinematikailag független impulzuszórázat, \mathbf{I}_1 és \mathbf{I}_2 , kifejezhető a

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_1 &= \sum_{\zeta, \zeta'} a_{\zeta}^+ (\zeta | \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} | \zeta') a_{\zeta'}, \\ \mathbf{I}_2 &= \sum_{\zeta, \zeta'} b_{\zeta}^+ (\zeta | \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} | \zeta') b_{\zeta'}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

alakban, ahol az a és b operátorok külön-külön (1.1)-nek tesznek eleget, egymás között pedig kommutálnak. A

$$\mathbf{I} = \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 \quad (3.2)$$

teljes impulzuszórázat sajátvektorainak tanulmányozásával kapcsolatban a következő skaláris operátorok játszanak fontos szerepet.

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_+ &= (a^+ b), & \mathcal{J}_- &= (b^+ a), \\ \mathcal{J}_3 &= \frac{1}{2} [(a^+ a) - (b^+ b)] = \frac{1}{2} (n_1 - n_2), \end{aligned} \quad (3.3)$$

valamint

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_+ &= [a^+ b^+], & \mathcal{K}_- &= [ab], \\ \mathcal{K}_3 &= \frac{1}{2} [(a^+ a) + (b^+ b)] + 1 = \frac{1}{2} n + 1. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Amint arról közvetlen számítással könnyen meggyőződhetünk, a \mathcal{J} és \mathcal{K} operátorok felcserélhetők egymással (és I -vel is), és eleget tesznek a

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_\pm] &= \pm \mathcal{J}_\pm, & [\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_-] &= 2\mathcal{J}_3, \\ [\mathcal{K}_3, \mathcal{K}_\pm] &= \pm \mathcal{K}_\pm, & [\mathcal{K}_+, \mathcal{K}_-] &= -2\mathcal{K}_3 \end{aligned} \quad (3.5)$$

összefüggéseknek. Látható, hogy a \mathcal{J} operátorok felcserélési tulajdonságai meg-
egyeznek az impulzusmomentum megszokott tulajdonságaival, a \mathcal{K} operátorok
pedig a K hiperbolikus impulzusmomentumhoz hasonlóak, melyet az első szakasz-
ban tárgyaltunk. A \mathcal{J}_3 , \mathcal{K}_3 operátorok sajátértékeit μ -vel, ill. ν -vel jelöljük. Ezen
mennyiségek jelentése a következő:

$$\mu = j_1 - j_2, \quad \nu = j_1 + j_2 + 1. \quad (3.6)$$

Az eredő impulzusmomentum négyzetét kiszámítva, találkozunk a következő
kifejezéssel:

$$2\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\zeta\zeta'\zeta''\zeta'''} a_\zeta^+ a_{\zeta'} b_{\zeta''}^+ b_{\zeta'''} (\zeta|\sigma|\zeta') \cdot (\zeta''|\sigma|\zeta''') = \sum_{\zeta\zeta'} a_\zeta^+ a_{\zeta'} b_\zeta^+ b_\zeta - \frac{1}{2} n_1 n_2. \quad (3.7)$$

Ez kifejezhető mind a \mathcal{J} , mind pedig a \mathcal{K} operátorok segítségével; fennáll ugyanis

$$\mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ = \sum_{\zeta\zeta'} b_\zeta^+ a_{\zeta'} a_\zeta^+ b_\zeta = n_2 + \sum_{\zeta\zeta'} a_\zeta^+ a_{\zeta'} b_\zeta^+ b_\zeta \quad (3.8)$$

és

$$\mathcal{K}_+ \mathcal{K}_- = \sum_{\zeta\zeta'} a_\zeta^+ b_{\zeta'}^+ (a_\zeta b_{\zeta'} - a_{\zeta'} b_\zeta) = n_1 n_2 - \sum_{\zeta\zeta'} a_\zeta^+ a_{\zeta'} b_\zeta^+ b_\zeta. \quad (3.9)$$

Valóban

$$\mathbf{I}^2 = \mathcal{J}_3(\mathcal{J}_3 + 1) + \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ = \mathcal{J}_3(\mathcal{J}_3 - 1) + \mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- \quad (3.10)$$

és

$$\mathbf{I}^2 = \mathcal{K}_3(\mathcal{K}_3 - 1) - \mathcal{K}_+ \mathcal{K}_- = \mathcal{K}_3(\mathcal{K}_3 + 1) - \mathcal{K}_- \mathcal{K}_+. \quad (3.11)$$

A \mathbf{I}^2 operátornak a \mathcal{J} impulzusmomentum-operátor segítségével megadott első,
megszokott előállítása alapján kapjuk:

$$j \equiv |\mu|, \quad (3.12)$$

vagy

$$j \equiv |j_1 - j_2|; \quad (3.13)$$

a hiperbolikus előállítás segítségével nyerjük:

$$\nu - 1 \equiv j, \quad (3.14)$$

vagy

$$j_1 + j_2 \equiv j. \quad (3.15)$$

A

$$j_1 + j_2 \equiv j \equiv |j_1 - j_2| \quad (3.16)$$

feltételre jutottunk; ez a két impulzusmomentum eredőjére érvényes jól ismert kor-
látozás.

A \mathbf{I}^2 operátor sajátvektorait célszerű I_3 , \mathcal{J}_3 , és \mathcal{K}_3 sajátértékeivel jellemezni.
Tekintettel (3.6)-ra, $\Psi(jm\mu\nu)$ sajátvektorok számára az ekvivalens $\Psi(j_1 j_2 jm)$ jelölés
is alkalmazható. Speciálisan a $\nu = j + 1$ -gyel jellemzett állapot $j_1 + j_2 = j$ -nek felel

meg, azonkívül $2j_1 = j + \mu$, $2j_2 = j - \mu$. Az a speciális állapot, amelyet az $m = j$ érték jellemez, csak egyféleképpen realizálható, minthogy $m = j_1 + j_2$ csak akkor teljesülhet, ha $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2$. Eszerint

$$\Psi(jj\mu j+1) = \frac{(a_+^+)^{j+\mu}}{((j+\mu)!)^{\frac{1}{2}}} \frac{(b_+^+)^{j-\mu}}{((j-\mu)!)^{\frac{1}{2}}} \Psi_0. \quad (3.17)$$

Tetszőleges vonatkoztatási rendszert választva, (2.4) folyományaképpen ez az eredmény a

$$((2j)!)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=-j}^j \varphi_{jm}(x) \Psi(jm\mu j+1) = \frac{(xa^+)^{j+\mu}(xb^+)^{j-\mu}}{[(j+\mu)!(j-\mu)!]^{\frac{1}{2}}} \Psi_0 \quad (3.18)$$

alakot ölti. Ezt az egyenletet, mely (1.13)-nak a \mathcal{J} analogonja, szorozzuk meg $\varphi_{j\mu}(\xi)$ -vel és összegezzünk μ -re:

$$((2j)!)^{\frac{1}{2}} \sum_{m\mu} \varphi_{jm}(x) \varphi_{j\mu}(\xi) \Psi(jm\mu j+1) = \frac{(\xi_+(xa^+) + \xi_-(xb^+))^{2j}}{(2j)!} \Psi_0. \quad (3.19)$$

Ha még j -re is összegzünk, kapjuk:

$$\sum_{jm\mu} ((2j)!)^{\frac{1}{2}} \varphi_{jm}(x) \varphi_{j\mu}(\xi) \Psi(jm\mu j+1) = e^{\xi_+(xa^+) + \xi_-(xb^+)} \Psi_0. \quad (3.20)$$

Ahhoz, hogy a $\Psi(jm\mu\nu)$ sajátvektort teljesen meghatározzuk, szükségünk van (1.29) analogonjára, mely a ν tetszőleges értékével jellemzett sajátvektort a ν minimális értékéhez, $j+1$ -hez tartozó sajátvektor segítségével fejezi ki. Ebből a célból a⁶

$$V = t^{2\mathcal{K}_3-1} \quad (3.21)$$

operátort vizsgáljuk meg, melynek a következő tulajdonságai érdemelnek figyelmet:

$$t \frac{\partial}{\partial t} V = (2\mathcal{K}_3 - 1)V, \quad \left(t \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 V = (2\mathcal{K}_3 - 1)^2 V, \quad (3.22)$$

és

$$V^{-1} \mathcal{K}_- V = t^2 \mathcal{K}_-, \quad \mathcal{K}_- V = t^2 V \mathcal{K}_-. \quad (3.23)$$

Tekintetbe véve a

$$4\mathbb{I}^2 + 1 = (2\mathcal{K}_3 - 1)^2 - 4\mathcal{K}_+ \mathcal{K}_- \quad (3.24)$$

összefüggést, a

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{t} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{4\mathbb{I}^2 + 1}{t^2} \right) V - 4\mathcal{K}_+ V \mathcal{K}_- = 0 \quad (3.25)$$

egyenletet kapjuk, mely a Bessel-féle differenciálegyenlet rendezett operátoralakja. A megoldás

$$V = t^{(4\mathbb{I}^2+1)\frac{1}{2}} F_{(4\mathbb{I}^2+1)\frac{1}{2}}(t^2 \mathcal{K}_+; P; \mathcal{K}_-), \quad (3.26)$$

ahol P integrációs állandó, és a jelölés azt szándékozik kifejezni, hogy az (1.36) alatt definiált F függvény rendezett operátor-kifejtésében a P operátor \mathcal{K}_+ és \mathcal{K}_- hatványai között helyezkedik el. A Bessel-egyenlet második megoldását elvetettük,

⁶ Itt követett eljárásunk az A. Függelék általános módszerén alapszik.

tekintettel arra a tényre, hogy $t^{2\mathcal{K}_3-1}$ -nek $t \rightarrow 0$ esetén el kell tűnnie, mivel $\mathcal{K}_3 - 1$ nemnegatív. A (3.26) operátor így írható:

$$\begin{aligned} V &= \sum_j t^{2j+1} F_{2j+1}(t^2 \mathcal{K}_+; P_{j,j+1}; \mathcal{K}_-) = \\ &= \sum_j \sum_{v=j+1}^{\infty} t^{2v-1} P_{jv}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

ahol P_{jv} a jelzett sajátértékekhez tartozó állapot projekciós operátora. A Bessel-függvények ismert hatványsorát felhasználva írható:

$$P_{jv} = \omega_{jv}(\mathcal{K}_+) P_{j,j+1} \omega_{jv}(\mathcal{K}_-), \quad (3.28)$$

ahol

$$\omega_{jv}(\lambda) = \left[\frac{(2j+1)!}{(v+j)!(v-j-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \lambda^{v-j-1}. \quad (3.29)$$

Ily módon megkapjuk a kívánt összefüggést a sajátvektorok között:

$$\Psi(jm\mu v) = \omega_{jv}(\mathcal{K}_+) \Psi(jm\mu j+1). \quad (3.30)$$

Megjegyezzük, hogy ami j -t és v -t illeti, a (3.30) egyenlet a

$$j \rightarrow |m| - \frac{1}{2}, \quad v \rightarrow j + \frac{1}{2} \quad (3.31)$$

helyettesítéssel átmegy (1.29)-be, ami összhangban van K jelentésével. Az (1.35) és (1.37) generátorfüggvényeknek megfelelően kapjuk:

$$\sum_{v=j+1}^{\infty} \omega_{jv}(\lambda) \Psi(jm\mu v) = F_{2j+1}(\lambda \mathcal{K}_+) \Psi(jm\mu j+1), \quad (3.32)$$

és

$$((2j+1)!)^{-\frac{1}{2}} \sum_{v=j+1}^{\infty} \chi_{jv}(\lambda) \Psi(jm\mu v) = e^{\lambda \mathcal{K}_+} \Psi(jm\mu j+1), \quad (3.33)$$

ahol

$$\chi_{jv}(\lambda) = \left[\frac{(v+j)!}{(v-j-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \lambda^{v-j-1}. \quad (3.34)$$

Az $e^{\lambda \mathcal{K}_+}$ operátor alkalmazása (3.20)-ra a

$$\sum_{jm\mu v} (2j+1)^{-\frac{1}{2}} \varphi_{jm}(x) \varphi_{j\mu}(\xi) \chi_{jv}(\lambda) \Psi(jm\mu v) = e^{\lambda [a+b+] + \xi_+ (xa+) + \xi_- (xb+)} \Psi_0 \quad (3.35)$$

eredményre vezet.

Némileg explicitebb módon⁷ lépnek fel a sajátvektorok az $\omega_{jv}(\mathcal{K}_+)$ operátor-

⁷ A megfelelő csoportelméleti képletben a normálási együttható nem lép fel automatikusan. B. L. van der Waerden, „Die gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik” (Berlin, 1932).

nak a (3.18) egyenletre való alkalmazásával nyert eredményben:

$$\sum_{m=-j}^j \varphi_{jm}(x) \Psi(j_1 j_2 jm) = \left[\frac{2j+1}{(j_1+j_2+j+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{[a^+b^+]^{j_1+j_2-j} \cdot (xa^+)^{j+j_1-j_2} \cdot (xb^+)^{j_2+j-j_1}}{[(j_1+j_2-j)! (j+j_1-j_2)! (j_2+j-j_1)!]^{\frac{1}{2}}} \right] \Psi_0; \quad (3.36)$$

itt a j_1, j_2 kvantumszámokat használtuk μ és ν helyett. Abból a célból, hogy (3.36)-ot a

$$(j_1 j_2 jm | j_1 m_1 j_2 m_2) = (\Psi(j_1 j_2 jm), \Psi(j_1 m_1 j_2 m_2)) \quad (3.37)$$

transzformációs függvényre vonatkozó célszerű kifejezéssé alakítsuk át, az $x_+ \rightarrow z_+^*$, $x_- \rightarrow -z_+^*$ helyettesítést alkalmazzuk, majd képezzük (3.36) skalárszorzatát a $\Psi(j_1 m_1 j_2 m_2)$ vektorok

$$\sum_{j_1 m_1 j_2 m_2} \varphi_{j_1 m_1}(x) \varphi_{j_2 m_2}(y) \Psi(j_1 m_1 j_2 m_2) = e^{(xa^+) + (yb^+)} \Psi_0 \quad (3.38)$$

generátorfüggvényével. Ily módon kapjuk:

$$\sum_{m_1 m_2 m_3} \varphi_{j_1 m_1}(x) \varphi_{j_2 m_2}(y) \varphi_{j_3 m_3}(z) X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) = [(j_1+j_2+j_3+1)!]^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{[yz]^{j_2+j_3-j_1} \cdot [zx]^{j_3+j_1-j_2} \cdot [xy]^{j_1+j_2-j_3}}{[(j_2+j_3-j_1)! (j_3+j_1-j_2)! (j_1+j_2-j_3)!]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.39)$$

ahol⁸

$$(j_1 j_2 jm | j_1 m_1 j_2 m_2) = (2j+1)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1-j_2+m} X(j_1 j_2 j; m_1 m_2 -m). \quad (3.40)$$

Megszorozva a (3.39) egyenletet a

$$\Phi_{j_1 j_2 j_3}(\alpha\beta\gamma) = [(I+1)!]^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha^{I-2j_1} \beta^{I-2j_2} \gamma^{I-2j_3}}{[(I-2j_1)! (I-2j_2)! (I-2j_3)!]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.41)$$

$$(I = j_1 + j_2 + j_3)$$

menyiséggel, és összegezve a j_1, j_2 és j_3 indexekre, a

$$\sum_{jm} \varphi_{j_1 m_1}(x) \varphi_{j_2 m_2}(y) \varphi_{j_3 m_3}(z) \Phi_{j_1 j_2 j_3}(\alpha\beta\gamma) X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) = e^{\alpha[yz] + \beta[zx] + \gamma[xy]} \quad (3.42)$$

generátorfüggvényt kapjuk.

Az X együtthatók szimmetriatulajdonságait könnyen lezármaztathatjuk a generátorfüggvénynek bizonyos helyettesítésekkel szemben mutatott invarianciájából.

⁸ Az X együttható G. Racah [*Phys. Rev.* **62**, 438 (1942)] V együtthatójával áll egyszerű kapcsolatban: $X = (-1)^{j_2+j-j_1} V$. Az X együtthatót azért vezettük be, mert szimmetrikusabb; vö. a (3.44), (3.45) egyenleteket Racah dolgozatának (19a) egyenletével (Racah dolgozatára az alábbiakban az R megjelöléssel hivatkozunk). A ford. megjegyzése: Az X együttható megegyezik Wigner három— j —szimbólumával, azaz

$$X(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) = \begin{pmatrix} j_1 j_2 j \\ m_1 m_2 m \end{pmatrix}.$$

Így az, hogy X nem változik, ha az x_+ , y_+ , z_+ mennyiségeket $e^{(i/2)\psi}$ -vel, az x_- , y_- , z_- mennyiségeket pedig $e^{-(i/2)\psi}$ -vel szorozzuk meg, mutatja, hogy X eltűnik, hacsak

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0 \quad (3.43)$$

nem teljesül. A generátorfüggvénynek x , y , z és α , β , γ szimultán ciklikus permutációival szemben mutatott invarianciája az X mennyiségek

$$X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) = X(j_2 j_3 j_1; m_2 m_3 m_1) = X(j_3 j_1 j_2; m_3 m_1 m_2) \quad (3.44)$$

szimmetriatulajdonságait vonja maga után. Ha x és y felcserélését az $\alpha \leftrightarrow -\beta$, $\gamma \leftrightarrow -\gamma$ helyettesítésekkel kombináljuk, megkapjuk az X együtthatók viselkedését nem-ciklikus permutációkkal szemben:

$$\begin{aligned} X(j_2 j_1 j_3; m_2 m_1 m_3) &= X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_3 m_2) = X(j_3 j_2 j_1; m_3 m_2 m_1) = \\ &= (-1)^I X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3); \end{aligned} \quad (3.45)$$

az x_+ , y_+ , z_+ változókat az x_- , y_- , z_- változókkal felcserélve, és α , β , γ előjelét ellentettre változtatva kapjuk:

$$X(j_1 j_2 j_3; -m_1 -m_2 -m_3) = (-1)^I X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3). \quad (3.46)$$

A (3.37) transzformációs függvények innen következő tulajdonságai pl.

$$\begin{aligned} (j_2 j_1 j m | j_2 m_2 j_1 m_1) &= (j_1 j_2 j -m | j_1 -m_1 j_2 -m_2) = \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 - j} (j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Az $X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3)$ együttható számára (3.39) kifejtésével a következő kifejezést kapjuk:

$$X(j; m) = [(I+1)!]^{-\frac{1}{2}} \sum_n (-1)^n \prod_{i=1}^3 \frac{[(j_i + m_i)!(j_i - m_i)!(I - 2j_i)!]^{\frac{1}{2}}}{(I - 2j_i - n_i)! n_i!}, \quad (3.48)$$

ahol

$$n = n_1 + n_2 + n_3, \quad (3.49)$$

s az összegezés n_i mindazon értékeire terjesztendő ki, amelyek eleget tesznek az

$$I - 2j_i \geq n_i \geq 0 \quad (3.50)$$

és

$$n_2 - n_3 = m_1 - j_2 + j_3, \quad n_3 - n_1 = m_2 - j_3 + j_1, \quad n_1 - n_2 = m_3 - j_1 + j_2 \quad (3.51)$$

feltételeknek. Az utóbbi feltételek a következő alakban is felírhatók:

$$\begin{aligned} I - 2j_1 - n_1 &= j_2 + m_2 - n_3 = j_3 - m_3 - n_2, \\ I - 2j_2 - n_2 &= j_3 + m_3 - n_1 = j_1 - m_1 - n_3, \\ I - 2j_3 - n_3 &= j_1 + m_1 - n_2 = j_2 - m_2 - n_1. \end{aligned} \quad (3.52)$$

E mennyiségek nemnegatív voltából következik, hogy az n_i számok egyértelműen meg vannak határozva, ha a kilenc egész szám: $I - 2j_i$, $j_i + m_i$, $j_i - m_i$ közül egy zérus. Általában a (3.48) összeg tagjainak száma eggyel nagyobb, mint ezen kilenc egész szám legkisebbike. Tetszésünkre van bízva, hogy az n_i számok közül melyeket választjuk összegezési paraméternek.

Az X együttható ugyancsak kifejezhető zárt alakban, ha az $|m_i|$ számok az adott j_i mellett lehetséges legkisebb értéket veszik fel. A legegyszerűbb példát erre $X(j_1 j_2 j_3; 000)$ szolgáltatja (j_1, j_2, j_3 egész). Megjegyezzük, hogy ez a mennyiség eltűnik (3.46) értelmében, ha $\frac{1}{2}I$ nem egész szám. A követendő eljárás: alkalmazzuk az $x_- = \partial/\partial x_+$, valamint az y_- és z_- változókra vonatkozó analóg helyettesítést, s a deriváltakat az $x_+ = y_+ = z_+ = 0$ helyen vesszük. Minthogy

$$[(j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!]^{-\frac{1}{2}} \cdot (\partial/\partial x_+)^{j_1 - m_1} x_+^{j_1 + m_1} \Big|_{x_+ = 0} = \delta_{m_1, 0}, \quad (3.53)$$

ez végeredményben elkülöníti az $m=0$ tagokat a (3.42) képletben. A generátorfüggvény redukciója a következő tétel segítségével végezhető el, mely rendezett operátorokra vonatkozik; ezt a tételt a B. Függelékben fogjuk bebizonyítani. Ha a és a^+ az $[a, a^+] = 1$ összefüggést teljesítő két operátor, $f(a^+)$ pedig egy tetszőleges függvény, fennáll:

$$e^{za; a^+} f(a^+) = \frac{1}{1-z} f\left(\frac{a^+}{1-z}\right) e^{\frac{z}{1-z} a^+; a}. \quad (3.54)$$

Ami ténylegesen felhasználásra kerül, az ennek az összefüggésnek a differenciáloperátoros ($a = \partial/\partial a^+$) alakja.

A számítás eredménye:

$$\sum_j \Phi_{j_1 j_2 j_3}(\alpha\beta\gamma) X(j_1 j_2 j_3; 000) = (1 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^{-1}; \quad (3.55)$$

ez $X(j; 0)$ generátorfüggvénye. Felhasználva az

$$\begin{aligned} (1 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^{-1} &= \sum_{I=0,2,\dots} (-1)^{\frac{1}{2}I} (\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^{\frac{1}{2}I} = \\ &= \sum_j (-1)^{\frac{1}{2}I} \left(\frac{1}{2}I\right)! \frac{\alpha^{I-2j_1} \beta^{I-2j_2} \gamma^{I-2j_3}}{(\frac{1}{2}I - j_1)! (\frac{1}{2}I - j_2)! (\frac{1}{2}I - j_3)!} \end{aligned} \quad (3.56)$$

képletet az

$$X(j; 0) = (-1)^{\frac{1}{2}I} \frac{(\frac{1}{2}I)!}{[(I+1)!]^{\frac{1}{2}}} \prod_{i=1}^3 \frac{[(I-2j_i)!]^{\frac{1}{2}}}{(\frac{1}{2}I - j_i)!} \quad (3.57)$$

explicit előállítást kapjuk.⁹

Általánosítva eljárásunkat, az $x_- \rightarrow \partial/\partial x_+$, $y_- \rightarrow \partial/\partial y_+$, $z_- \rightarrow \partial/\partial z_-$ helyettesítés elvégzése után a deriváltakat tetszőleges x_+ , y_+ és z_- mellett értékeljük ki. Minthogy

$$\begin{aligned} \varphi_{j_1 m_1}(x) &\rightarrow \left[\frac{(j_1 + m_1)!}{(j_1 - m_1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{x_+^{2m_1}}{(2m_1)!}, & m_1 \geq 0, \\ &0, & m_1 < 0, \end{aligned} \quad (3.58)$$

és

$$\begin{aligned} \varphi_{j_3 m_3}(z) &\rightarrow \left[\frac{(j_3 + |m_3|)!}{(j_3 - |m_3|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{z_-^{2|m_3|}}{(2|m_3|)!}, & m_3 \leq 0, \\ &0, & m_3 > 0; \end{aligned} \quad (3.59)$$

⁹ Ezt az eredményt tartalmazza $R(22')$ képlete.

ily módon megkapjuk az X együtthatót az $m_1 \geq 0, m_2 \geq 0, -m_3 = m_1 + m_2$ értékekre. Ha az m_i számok közül kettő negatív, X a (3.46) képletből határozható meg. A generátorfüggvény most

$$e^{\alpha[yz] + \beta[zx] + \gamma[xy]} \rightarrow (1 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^{-1} \cdot \exp \left\{ \frac{z_-}{1 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} [(\alpha\gamma - \beta)x_+ + (\beta\gamma - \alpha)y_+] \right\}; \quad (3.60)$$

kifejtve x_+, y_+ és z_- hatványai szerint a

$$\sum_j \Phi_{j_1 j_2 j_3}(\alpha\beta\gamma) \prod_i \left[\frac{(j_i + |m_i|)!}{(j_i - |m_i|)!} \right]^{\frac{1}{2}} X(j; m) = (2|m_3|)! \frac{(\alpha\gamma - \beta)^{2m_1} (\beta\gamma - \alpha)^{2m_2}}{(1 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^{2|m_3|+1}} \quad (3.61)$$

eredményt kapjuk.

A (3.61) képletben további kifejtést végezve kapjuk:

$$\begin{aligned} & \left[(I+1)! \prod_i \frac{(j_i + |m_i|)!}{(j_i - |m_i|)!} \frac{1}{(I-2j_i)!} \right]^{\frac{1}{2}} X(j; m) = \\ & = \sum_{n_1 n_2} (-1)^{\frac{1}{2} I_2 - 2|m_3|} \frac{(\frac{1}{2} I_3)!}{\prod_i (\frac{1}{2} I_i - j_i - |m_i|)!} \frac{(2m_1)!}{(2m_1 - n_1)! n_1!} \frac{(2m_2)!}{(2m_2 - n_2)! n_2!}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

ahol

$$I_1 = I + n_1 - n_2, \quad I_2 = I - n_1 + n_2, \quad I_3 = I + n_1 + n_2. \quad (3.63)$$

A kétszeres összeg azon nemnegatív számokra terjesztendő ki, amelyek eleget tesznek a

$$\begin{aligned} I - 2j_1 - n_2 &\geq 2m_1 - n_1 \geq 0, \\ I - 2j_2 - n_1 &\geq 2m_2 - n_2 \geq 0, \\ I - 2j_3 &\geq 2|m_3| - n_1 - n_2 \geq 0 \end{aligned} \quad (3.64)$$

feltételeknek, és amelyekre $I + n_1 + n_2$ páros szám. Ha a $I - 2j_i$ számok valamelyike eltűnik, vagy ha $m_1 = m_2 = 0$, úgy az összeg egyetlen tagból áll. Hasonló egyszerűsödést eredményez az a követelmény, hogy I_3 páros legyen. Eszerint

$$\begin{aligned} & \left[\frac{(j_1 + \frac{1}{2})(j_3 + \frac{1}{2})(I+1)!}{\prod_i (I-2j_i)!} \right]^{\frac{1}{2}} X(j_1 j_2 j_3; \frac{1}{2} 0 - \frac{1}{2}) = \\ & = (-1)^{\frac{1}{2} I - 1} \cdot \frac{(\frac{1}{2} I)!}{(\frac{1}{2} I - j_1 - \frac{1}{2})(\frac{1}{2} I - j_2)! (\frac{1}{2} I - j_3 - \frac{1}{2})!}, \quad I \text{ páros}, \\ & = (-1)^{\frac{1}{2} I + \frac{1}{2}} \cdot \frac{(\frac{1}{2} I + \frac{1}{2})!}{(\frac{1}{2} I - j_1)! (\frac{1}{2} I - j_2 - \frac{1}{2})! (\frac{1}{2} I - j_3)!}, \quad I \text{ páratlan}; \end{aligned} \quad (3.65)$$

ezek az X együtthatók $|m_i|$ minimális értéke mellett, ha a j_i -k közül kettő fél-egész.

A $\Psi(jm\mu\nu)$ sajátvektorok ortogonalitása és normáltsága (3.35) segítségével igazolható, az (1.21) képlethez vezető eljárás kiterjesztése útján. A C. Függelék (C7) egyenlete értelmében

$$\begin{aligned} & (\exp \{ \lambda [a^+ b^+] + \xi_+ (xa^+) + \xi_- (xb^+) \} \Psi_0, \exp \{ \kappa [a^+ b^+] + \eta_+ (ya^+) + \eta_- (yb^+) \} \Psi_0) = \\ & = \frac{1}{(1 - \lambda^* \kappa)^2} \exp \left[\frac{(\xi^* \eta)(x^* y)}{1 - \lambda^* \kappa} \right]; \end{aligned} \quad (3.66)$$

az

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(1 - \lambda^* \kappa)^2} \exp \left[\frac{(\xi^* \eta)(x^* y)}{1 - \lambda^* \kappa} \right] = \\ & \sum_{jm\mu\nu} \frac{1}{2j+1} \varphi_{jm}(x^*) \varphi_{jm}(y) \varphi_{j\mu}(\xi^*) \varphi_{j\mu}(\eta) \chi_{j\nu}(\lambda^*) \chi_{j\nu}(\kappa) \end{aligned} \quad (3.67)$$

kifejtést elvégezve a

$$(\Psi(jm\mu\nu), \Psi(j'm'\mu'\nu')) = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (3.68)$$

eredményre jutunk. A $\Psi(j_1 m_1 j_2 m_2) \rightarrow \Psi(j_1 j_2 jm)$ transzformáció, és az inverz transzformáció unitér volta a következő feltételeket rója ki az X együtthatókra:

$$\sum_{m_1 m_2} X(j_1 j_2 j_3, m_1 m_2 m_3) X(j_1 j_2 j'_3; m_1 m_2 m'_3) = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \quad (3.69)$$

és

$$\sum_{j_3 m_3} (2j_3+1) X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) X(j_1 j_2 j_3; m'_1 m'_2 m_3) = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (3.70)$$

A (3.69) képletből speciálisan következik:

$$\sum_m [X(j; m)]^2 = 1. \quad (3.71)$$

A forgásmátrixok

E szakasz eredményei felhasználhatók a 2. szakaszban bevezetett $U_{mm'}^{(j)}(\varphi \partial \psi)$ mátrixok tulajdonságainak további kifejtésére. Ha U a $I = I_1 + I_2$ impulzusmomentumú összetett rendszer forgásoperátora, U_1 és U_2 pedig az egyes impulzusmomentumokhoz tartozó operátorok, fennáll:

$$U = U_1 U_2, \quad (3.72)$$

tekintettel a (2.31) exponenciális alakra. Speciálisan a (2.59) tétel értelmében

$$\int U_1 U_2 d\omega = P_0, \quad (3.73)$$

ahol P_0 az eredő impulzusmomentum $j=0$ értékéhez tartozó projekciós operátor. Képezve az utóbbi egyenlet mátrixelemeit, a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} \int U_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(\omega) U_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(\omega) d\omega &= (j_1 m_1 j_2 m_2 | P_0 | j_1 m_1' j_2 m_2') \\ &= (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 00) (j_1 j_2 00 | j_1 m_1' j_2 m_2') \quad (3.74) \\ &= \frac{1}{2j_1 + 1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{-m_1 m_2} \delta_{-m_1' m_2'} (-1)^{m_1 - m_2'}, \end{aligned}$$

ugyanis

$$(j_1 j_2 00 | j_1 m_1 j_2 m_2) = (2j_1 + 1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_1 - m_1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{-m_1 m_2}. \quad (3.75)$$

Tekintettel a (2.41) összefüggésre, (3.74) így is írható:

$$\int U_{m_1 m_1'}^{(j_1)*}(\omega) U_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(\omega) d\omega = \frac{1}{2j_1 + 1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{m_1' m_2'}; \quad (3.76)$$

ez az alak kifejezi a forgásmátrixoknak, mint a forgási paraméterek függvényeinek az ortogonalitási tulajdonságait.

A $\chi^{(j)}$ átlósösszegre vonatkozóan (3.76)-ból az

$$\int \chi^{(j_1)*} \chi^{(j_2)} d\omega = \delta_{j_1 j_2} \quad (3.77)$$

ortogonalitási összefüggést kapjuk. Ez az integrál egyszerűbbé tehető, mivel $\chi^{(j)}$ csak a γ forgási szögtől függ. Írható:

$$d\omega = \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} d\gamma \sin \frac{1}{2} \gamma \delta \left(\cos \frac{1}{2} \gamma - \cos \frac{1}{2} \vartheta \cdot \cos \frac{\varphi + \psi}{2} \right) d\omega; \quad (3.78)$$

elvégezve az integrálást $d\omega$ szerint, kapjuk:

$$\int_0^{2\pi} \chi^{(j_1)}(\gamma)^* \chi^{(j_2)}(\gamma) \frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{\gamma}{2} d\gamma = \delta_{j_1 j_2}. \quad (3.79)$$

Térjünk vissza a (3.72) képlethez. Ennek mátrixeleme:

$$\begin{aligned} U_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(\omega) U_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(\omega) &= \sum_{j m m'} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m) U_{m m'}^{(j)}(\omega) (j_1 j_2 j m | j_1 m_1' j_2 m_2') = \\ &= \sum_{j m m'} (2j + 1) X(j_1 j_2 j; m_1 m_2 - m) (-1)^{m - m'} U_{m m'}^{(j)}(\omega) X(j_1 j_2 j; m_1' m_2' - m'), \quad (3.80) \end{aligned}$$

vagy

$$\begin{aligned} U_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(\omega) U_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(\omega) &= \\ &= \sum_{j m m'} (2j + 1) X(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) U_{m m'}^{(j)}(\omega)^* X(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m'). \quad (3.81) \end{aligned}$$

A (3.76) ortogonalitási összefüggést felhasználva, helyett a szimmetrikusabb

$$\int U_{m_1 m_1'}^{(j_1)} U_{m_2 m_2'}^{(j_2)} U_{m_3 m_3'}^{(j_3)} d\omega = X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) X(j_1 j_2 j_3; m_1' m_2' m_3') \quad (3.82)$$

alak is felírható. Ezen integrál speciális eseteit nyerjük az

$$U_{m0}^{(l)} = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{lm}^*(\vartheta\varphi) \quad (3.83)$$

és

$$U_{00}^{(l)} = P_l(\cos \vartheta) \quad (3.84)$$

választás mellett; itt Y_{lm} az l egész számmal jellemzett gömbfüggvény, $P_l(\cos \vartheta)$ pedig Legendre-polinomot jelöl. Eszerint

$$\int Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} Y_{l_3 m_3} \frac{1}{2} \sin \vartheta d\vartheta \frac{1}{2\pi} d\varphi = \left[\prod_i \left(\frac{2l_i + 1}{4\pi} \right) \right]^{\frac{1}{2}} X(l; 0) X(l; m) \quad (3.85)$$

és

$$\int_0^\pi P_{l_1}(\cos \vartheta) P_{l_2}(\cos \vartheta) P_{l_3}(\cos \vartheta) \frac{1}{2} \sin \vartheta d\vartheta = [X(l; 0)]^2. \quad (3.86)$$

Az átlósösszeg multiplikatív tulajdonsága (3.80) értelmében

$$\chi^{(j_1)}(\gamma) \chi^{(j_2)}(\gamma) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} \chi^{(j)}(\gamma); \quad (3.87)$$

ugyanaz az

$$\int_0^{2\pi} \chi^{(j_1)} \chi^{(j_2)} \chi^{(j_3)} \frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{1}{2} \gamma d\gamma = \begin{cases} 1, & I-2j_i \geq 0, \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (3.88)$$

alakban is kifejezhető. Ez felfogható mint az impulzusmomentumok összeadási törvényének projekciós operátorok segítségével kifejezett alakja:

$$P_{j_1} P_{j_2} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} P_j; \quad (3.89)$$

(3.87) ugyanis oly módon nyerhető, hogy (3.89)-et megszorozzuk $U_1 U_2 = U$ -val, majd képezzük ezen egyenlet átlósösszegét.

E szakasz befejezéseképpen leszarmaztatjuk a $\chi^{(j)}(\omega)$ és $U_{mm'}^{(j)}(\omega)$ függvényekre érvényes teljességi összefüggéseket. Hivatkozunk $\chi^{(j)}$ generátorfüggvényének (2.36) kifejezésére; abban t helyére $te^{(i/2)\gamma'}$ -t írunk. Ily módon kapjuk:

$$\sum_j t^{2j} \chi^{(j)}(\omega) e^{i(j+\frac{1}{2})\gamma'} = \frac{1}{(1+t^2) \cos \frac{\gamma'}{2} - 2t \cos \frac{\gamma}{2} - i \sin \frac{\gamma'}{2} (1-t^2)}; \quad (3.90)$$

ennek képzetes része így írható:

$$\begin{aligned} & \sum_j t^{2j} \chi^{(j)}(\omega) \chi^{(j)}(\omega') = \\ & = \frac{(1-t^2)}{(1-t^2)^2 \left(1 - \frac{4t}{(1+t)^2} \cos \frac{\gamma}{2} \cos \frac{\gamma'}{2} \right) + 4t^2 \left(\cos \frac{\gamma}{2} - \cos \frac{\gamma'}{2} \right)^2}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Végezzük el itt a $t \rightarrow 1$ határátmenetet; a jól ismert

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \delta(x) \quad (3.92)$$

eredményt tekintetbe véve kapjuk:

$$\sum_j \chi^{(j)}(\omega) \chi^{(j)}(\omega') = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sin(\gamma/2)} \delta\left(\cos \frac{\gamma}{2} - \cos \frac{\gamma'}{2}\right). \quad (3.93)$$

Fennáll azonban:

$$\int \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sin \gamma/2} \delta\left(\cos \frac{\gamma}{2} - \cos \frac{\gamma'}{2}\right) d\omega = \int_0^{2\pi} \delta\left(\cos \frac{\gamma}{2} - \cos \frac{\gamma'}{2}\right) \sin \frac{\gamma}{2} \frac{1}{2} d\gamma = 1, \quad (3.94)$$

úgyhogy (3.93) a következőképpen írható:

$$\sum_j \chi^{(j)}(\omega) \chi^{(j)}(\omega') = \delta(\omega - \omega'), \quad (3.95)$$

ami a $\chi^{(j)}$ átlósösszegek teljességi relációja. Specializáljuk (3.95)-öt, behelyettesítve a $\gamma' = 0$ értéket. Kapjuk:

$$\sum_j (2j+1) \chi^{(j)}(\omega) = \delta(\omega). \quad (3.96)$$

Az egymást követő elforgatások összetevését fejezi ki a következő operátor-összefüggés:

$$U(\omega) U^{-1}(\omega') = U(\omega - \omega'). \quad (3.97)$$

Képezzük ezen egyenlet spurját a j kvantumszámhoz tartozó állapotok rendszerében; tekintettel U unitér voltára, kapjuk:

$$\sum_{mm'} U_{mm'}^{(j)}(\omega) U_{mm'}^{(j)}(\omega')^* = \chi^{(j)}(\omega - \omega') \quad (3.98)$$

ez, jellegét tekintve, addíciós tétel. Az $U_{mm'}^{(j)}(\omega)$ mátrixelemek teljességi összefüggéséhez oly módon juthatunk el, hogy (3.98)-at megszorozzuk $2j+1$ -gyel és összegezzünk j -re. Figyelembe véve (3.96)-ot, kapjuk:

$$\sum_{jmm'} (2j+1) U_{mm'}^{(j)}(\omega) U_{mm'}^{(j)}(\omega')^* = \delta(\omega - \omega'). \quad (3.99)$$

A (3.98), (3.99) összefüggéseket integrálva a ψ Euler-szög szerint, megkapjuk a gömbfüggvényekre vonatkozó addíciós tételt, ill. teljességi relációt.

4. Három és négy impulzusmomentum eredője

Három impulzusmomentum eredőjének sajátvektorai többféleképpen megszerkeszthetők, mint azt

$$\mathbf{I} = \mathbf{I}_1 + (\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_3) = \mathbf{I}_2 + (\mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_1) = \mathbf{I}_3 + (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2) \quad (4.1)$$

mutatja. Eszerint az első lehetőség: megszerkesztjük a $\Psi(j_1 m_1 j_2 j_3 j_{23} m_{23})$ sajátvektort, majd $\Psi(j_1 [j_2 j_3] j_{23} j m)$ -et, míg az utolsó módszer $\Psi(j_3 [j_1 j_2] j_{12} j m)$ -et szolgáltatja.

A $[j_2 j_3]$ jelölés, például, azt kívánja kifejezni, hogy ezek az impulzusmomentumok nem jutnak szerephez explicit módon, amikor j_1 és j_{23} összeadásával megkapjuk a j momentumot. Hasonlóképpen, négy impulzusmomentumból is többféleképpen képezhetők párok:

$$\mathbf{I} = (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2) + (\mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_4) = (\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_3) + (\mathbf{I}_4 + \mathbf{I}_1) = (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_3) + (\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_4); \quad (4.2)$$

itt az első módszer, mondjuk, a $\Psi([j_1 j_2] j_{12} [j_3 j_4] j_{34} j m)$ állapotvektort

$$\Psi(j_1 j_2 j_{12} m_{12} j_3 j_4 j_{34} m_{34})$$

közbeiktatásával adja meg. Ebben a szakaszban feladatunk: kiszámítani a transzformációs függvényt, amely négy impulzusmomentum két ilyen összeadási skémáját egymással összeköti. A három impulzusmomentumra vonatkozó hasonló feladat e szimmetrikusabb probléma speciális esetének tekinthető.

Az impulzusmomentumok páronkénti összeadásának megkönnyítése céljából megjegyezzük, hogy a (3.35) generátorfüggvény, ha azt a

$$\begin{aligned} \sum_{j_1 j_2 j m} (2j+1)^{-\frac{1}{2}} \varphi_{jm}(x) \Phi_{j_1 j_2 j}(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3) \Psi(j_1 j_2 j m) = \\ = \exp(\alpha_3 [a^+ b^+] + \alpha_2 (x a^+) + \alpha_1 (x b^+)) \Psi_0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

alakban írjuk fel, a

$$\sum_{j_1 m_1 j_2 m_2} \varphi_{j_1 m_1}(t_1) \varphi_{j_2 m_2}(t_2) \Psi(j_1 m_1 j_2 m_2) = \exp((t_1 a^+) + (t_2 b^+)) \Psi_0 \quad (4.4)$$

kifejezésből az

$$\exp \left(\alpha_3 \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial t_2} \right] + \alpha_2 \left(x \frac{\partial}{\partial t_1} \right) + \alpha_1 \left(x \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \right) \quad (4.5)$$

differenciáloperátor alkalmazásával nyerhető; a deriváltakat a $t_1 = t_2 = 0$ helyen kell venniük. Hasonlóképpen, ha (4.5)-öt, valamint az

$$\exp \left(\beta_3 \left[\frac{\partial}{\partial t_3} \frac{\partial}{\partial t_4} \right] + \beta_2 \left(y \frac{\partial}{\partial t_3} \right) + \beta_1 \left(y \frac{\partial}{\partial t_4} \right) \right) \quad (4.6)$$

differenciáloperátort $\Psi(j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3 j_4 m_4)$ generátorfüggvényére, az

$$\exp((t_1 a^+) + (t_2 b^+) + (t_3 c^+) + (t_4 d^+)) \Psi_0 \quad (4.7)$$

kifejezésre alkalmazzuk, a $\Psi(j_1 j_2 j_{12} m_{12} j_3 j_4 j_{34} m_{34})$ állapotvektorok generátorfüggvényét kapjuk. Ha ezek után az

$$\exp \left(\gamma_3 \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right] + \gamma_2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} \right) + \gamma_1 \left(z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \quad (4.8)$$

operátort alkalmazzuk, a

$$\begin{aligned} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4 j_{12} j_{34} j m} [(2j_{12}+1)(2j_{34}+1)(2j+1)]^{-\frac{1}{2}} \varphi_{jm}(z) \Phi_{j_1 j_2 j_{12}}(\alpha) \cdot \\ \cdot \Phi_{j_3 j_4 j_{34}}(\beta) \Phi_{j_{12} j_{34} j}(\gamma) \Phi([j_1 j_2] j_{12} [j_3 j_4] j_{34} j m) = e^Q \Psi_0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

összefüggést nyerjük, ahol

$$Q = \alpha_3[a^+b^+] + \beta_3[c^+d^+] + \gamma_3\alpha_1\beta_1[b^+d^+] + \gamma_3\alpha_1\beta_2[b^+c^+] + \gamma_3\alpha_2\beta_1[a^+d^+] + \\ + \gamma_3\alpha_2\beta_2[a^+c^+] + \gamma_2\alpha_2(za^+) + \gamma_2\alpha_1(zb^+) + \gamma_1\beta_2(zc^+) + \gamma_1\beta_1(zd^+). \quad (4.10)$$

A (4.9) összefüggés azon fontos speciális esete, mely a $j=0$ kvantumszámhoz tartozó sajátvektorokat adja meg, a $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$, $\gamma_3 = 1$ helyettesítéssel áll elő. Az eredmény:

$$\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4 j'} (2j' + 1)^{-\frac{1}{2}} \Phi_{j_1 j_2 j'}(\alpha) \Phi_{j_3 j_4 j'}(\beta) \Psi([j_1 j_2] j' [j_3 j_4] j' 00) = e^R \Psi_0,$$

$$R = \alpha_3[a^+b^+] + \beta_3[c^+d^+] + \alpha_1\beta_1[b^+d^+] + \alpha_1\beta_2[b^+c^+] + \alpha_2\beta_1[a^+d^+] + \alpha_2\beta_2[a^+c^+], \quad (4.11)$$

ahol $j' = j_{12} = j_{34}$. Az impulzusmomentumokat másképpen összeadva az analóg

$$\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4 j''} (2j'' + 1)^{-\frac{1}{2}} \Phi_{j_1 j_2 j''}(\alpha') \Phi_{j_3 j_4 j''}(\beta') \Psi([j_1 j_3] j'' [j_2 j_4] j'' 00) = e^{R'} \Psi_0,$$

$$R' = \alpha'_3[a^+c^+] + \beta'_3[b^+d^+] + \alpha'_1\beta'_1[c^+d^+] + \alpha'_1\beta'_2[c^+b^+] + \alpha'_2\beta'_1[a^+d^+] + \alpha'_2\beta'_2[a^+b^+] \quad (4.12)$$

egyenletet kapjuk. A két szkémát összekötő transzformációs függvényt¹⁰

$$\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4 j' j''} (-1)^{j' + j'' - j_1 - j_4} \Phi_{j_1 j_2 j'}(\alpha) \Phi_{j_3 j_4 j'}(\beta) \Phi_{j_1 j_3 j''}(\alpha') \Phi_{j_2 j_4 j''}(\beta') W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') = \\ = (e^R \Psi_0, e^{R'} \Psi_0) \quad (4.13)$$

határozza meg; itt a

$$([j_1 j_2] j' [j_3 j_4] j' 0 | [j_1 j_3] j'' [j_2 j_4] j'' 0) = \\ = (-1)^{j' + j'' - j_1 - j_4} [(2j' + 1)(2j'' + 1)]^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') \quad (4.14)$$

jelölést alkalmaztuk.¹¹

Használjuk fel most az [lásd (C 28)]

$$\left\{ \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^4 \lambda_{\mu\nu}^* [A_\mu^+ A_\nu^+] \right\} \Psi_0, \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^4 \kappa_{\mu\nu} [A_\mu^+ A_\nu^+] \right\} \Psi_0 \right\} = \\ = \left[1 - \frac{1}{2} \sum \lambda_{\mu\nu}^* \kappa_{\mu\nu} + |\lambda^*|^{\frac{1}{2}} |\kappa|^{\frac{1}{2}} \right]^{-2} \quad (4.15)$$

tételt, ahol $A_{\zeta\mu}$ négy kétkomponensű operátort jelöl, melyekre az

$$[A_{\zeta\mu}, A_{\zeta'\nu}^+] = \delta_{\mu\nu} \delta_{\zeta\zeta'} \quad (4.16)$$

¹⁰ Az egyszerűség kedvéért feltettük, hogy az α , β paraméterek valósak. A (4.18) generátorfüggvény korlátozás nélkül érvényes.

¹¹ Az itt definiált W együttható megegyezik azzal, amelyet R tárgyal.

felcserélési összefüggés teljesül; $|\lambda|$ és $|\kappa|$ a $\lambda_{\mu\nu}$, ill. $\kappa_{\mu\nu}$ mátrix determinánsát jelöli. Esetünkben

$$|\lambda|^{\frac{1}{2}}|\kappa|^{\frac{1}{2}} = -\alpha_3\beta_3\alpha'_3\beta'_3, \\ \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \lambda_{\mu\nu} \kappa_{\mu\nu} = \alpha_3\alpha'_2\beta'_2 + \beta_3\alpha'_1\beta'_1 + \alpha'_3\alpha_2\beta_2 + \beta'_3\alpha_1\beta_1 - \alpha_1\beta_2\alpha'_1\beta'_2 + \alpha_2\beta_1\alpha'_2\beta'_1. \quad (4.17)$$

Megváltoztatva α_1 és β'_3 előjelét, a W együtthatók generátorfüggvényét kapjuk a

$$\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4 j' j''} \Phi_{j_1 j_2 j'}(\alpha) \Phi_{j_3 j_4 j'}(\beta) \Phi_{j_1 j_3 j''}(\alpha') \Phi_{j_2 j_4 j''}(\beta') W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') = \\ = [1 - \alpha_3\alpha'_2\beta'_2 - \beta_3\alpha'_1\beta'_1 - \alpha'_3\alpha_2\beta_2 - \beta'_3\alpha_1\beta_1 - \alpha_1\beta_2\alpha'_1\beta'_2 - \alpha_2\beta_1\alpha'_2\beta'_1 + \alpha_3\beta_3\alpha'_3\beta'_3]^{-2} \quad (4.18)$$

alakban.

A

$$W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') = W(j_2 j_1 j_4 j_3; j' j'') = W(j_3 j_4 j_1 j_2; j' j'') = W(j_1 j_3 j_2 j_4; j'' j') \quad (4.19)$$

képletekkel kifejezett szimmetriatulajdonságok következnek a (4.18) képletnek az

$$\alpha_1 \leftrightarrow \alpha_2, \beta_1 \leftrightarrow \beta_2, \alpha' \leftrightarrow \beta'; \quad \alpha'_1 \leftrightarrow \alpha'_2, \beta'_1 \leftrightarrow \beta'_2, \alpha \leftrightarrow \beta, \alpha \leftrightarrow \alpha', \beta \leftrightarrow \beta'$$

helyettesítésekkel szemben mutatott invarianciájából; a bonyolultabb

$$(\alpha_1\alpha_2\alpha_3) \rightarrow (-\alpha_3\alpha_2\alpha_1), \quad (\alpha'_1\alpha'_2\alpha'_3) \leftrightarrow (\beta_3\beta_1\beta_2), \quad (\beta'_1\beta'_2\beta'_3) \rightarrow (\beta'_1\beta'_3-\beta'_2)$$

transzformáció pedig a

$$W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') = (-1)^{j'+j''-j_1-j_4} W(j' j_2 j_3 j''; j_1 j_4) \quad (4.20)$$

összefüggést szolgáltatja. A (4.19), (4.20) képletek ismételt alkalmazásával W számára huszonnégy ekvivalens alakot nyerünk.

A W együtthatók további sajátosságai következnek a (4.14) transzformációs függvény összetevési tulajdonságaiból; ezt átmenetileg az (12, 34j' | 13, 24j'') szimbólummal jelöljük. Eszerint

$$\sum_{j''} (12, 34j' | 13, 24j'')(13, 24j'' | 12, 34j''') = \delta_{j' j'''} \quad (4.21)$$

és

$$\sum_{j''} (12, 34j' | 13, 24j'')(13, 24j'' | 14, 23j''') = (12, 34j' | 14, 23j'''). \quad (4.22)$$

Mindezek kifejezhetők W segítségével. A (4.14) képletből 2 és 4, valamint 3 és 4 felcserélése útján, (3.47) segítségével kapjuk:

$$(13, 24j'' | 14, 23j''') = (-1)^{j_2+j_3+j_4-j_1} [(2j''+1)(2j''' + 1)]^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_4 j_3 j_2; j'' j''') \quad (4.23)$$

és

$$(12, 34j' | 14, 23j''') = (-1)^{j''+j_4-j_1} [(2j'+1)(2j''' + 1)]^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_2 j_4 j_3; j' j'''). \quad (4.24)$$

Ennélfogva

$$\sum_{j''} (2j''+1) W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') W(j_1 j_2 j_3 j_4; j'' j''') = \frac{1}{2j'+1} \delta_{j' j'''} \quad (4.25)$$

és

$$\sum_{j''} (-1)^{j'+j''+j'''+j_1+j_2+j_3+j_4} (2j''+1) W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') W(j_1 j_4 j_3 j_2; j'' j''') = \\ = W(j_1 j_2 j_4 j_3; j' j'''). \quad (4.26)$$

Kombináljuk ezeket a képleteket, (4.26)-ba a $j_2 = j_4$, $j' = j''$ értékeket behelyettesítve, majd $2j' + 1$ -gyel való szorzás után (4.25) segítségével elvégezve az összegezést j' -re. Így módon kapjuk:

$$\sum_{j'} (2j' + 1) W(j_1 j_2 j_2 j_3; j' j') = \sum_{j''} (-1)^{j'' - j_2 + j_3}; \quad (4.27)$$

itt j'' azokat az értékeket veszi fel, amelyek összeférnek $W(j_1 j_2 j_3 j_2; j' j'')$ létezésével, nevezetesen: $j'' \equiv |j_1 - j_3|$, $j'' \equiv j_1 + j_3$, $2j_2$. Ennek megfelelően

$$\sum_{j'} (2j' + 1) W(j_1 j_2 j_2 j_3; j' j') = \begin{cases} 1, & \text{ha } k \text{ páros,} \\ 0, & \text{ha } k \text{ páratlan,} \end{cases} \quad (4.28)$$

ahol k a $j_1 + j_3 - |j_1 - j_3|$ és $2j_2 - |j_1 - j_3|$ egész számok közül a kisebbet jelöli. A (4.28) összefüggés egyik következménye:

$$W(j_1 j_2 j_2 0; j_2 j_2) = \frac{1}{2j_2 + 1}, \quad j_1 \leq 2j_2; \quad (4.29)$$

ez speciális esete a

$$W(j_1 j_2 j_3 0; j_3 j_2) = [(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)]^{-\frac{1}{2}}, \quad |j_2 - j_3| \leq j_1 \leq j_2 + j_3 \quad (4.30)$$

képletnek, mely (4.14)-ből következik, ha megjegyezzük, hogy $j_4 = 0$ mellett j_2 és j_3 felcserélése a sajátvektort egyszerűen a $(-1)^{j_2 + j_3 - j_1}$ tényezővel szorozza meg.

A W és X együtthatók között fennálló összefüggés (4.14)-ből olvasható ki. Írjuk:

$$\begin{aligned} \Psi([j_1 j_2] j' [j_3 j_4] j' 0) &= \\ &= \sum_{m_{12}} (2j' + 1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j' - m_{12}} \Psi(j_1 j_2 j' m_{12} j_3 j_4 j' - m_{12}) = \\ &= (2j' + 1)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1 + j_3 - j_2 - j_4} \sum_{m_{12}} X(j_1 j_2 j'; m_1 m_2 - m_{12}) (-1)^{j' - m_{12}} \cdot \\ &\quad \cdot X(j_3 j_4 j'; m_3 m_4 m_{12}) \Psi(j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3 j_4 m_4); \end{aligned} \quad (4.31)$$

ezt, valamint $\Psi([j_1 j_3] j'' [j_2 j_4] j'')$ hasonló előállítását felhasználva kapjuk:

$$\begin{aligned} &\sum_m X(j_1 j_2 j'; m_1 m_2 - m_{12}) (-1)^{j' - m_{12}} X(j_3 j_4 j'; m_3 m_4 m_{12}) \cdot \\ &\cdot X(j_1 j_3 j''; m_1 m_3 - m_{13}) (-1)^{j'' - m_{13}} X(j_2 j_4 j''; m_2 m_4 m_{13}) = \\ &= (-1)^{j' + j'' + j_1 + j_4} W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j''). \end{aligned} \quad (4.32)$$

A W számára a (4.18) generátorfüggvény kifejtése útján kapott általános kifejezés a

$$W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'') = \prod_r [(n + p + 1 - n_r)!]^{-\frac{1}{2}} \prod_{r,s} [(n_r + p_s)!]^{\frac{1}{2}} \sum (-1)^{p_3} \frac{(n + p + 1)}{\prod_{r,s} n_r! p_s!} \quad (4.33)$$

alakban írható fel, ahol

$$n = \sum_{r=1}^4 n_r, \quad p = \sum_{s=1}^3 p_s; \quad (4.34)$$

az összegezés azon nemnegatív n_r, p_s egész számokra terjesztendő ki, amelyekre fennáll

$$\begin{aligned} j_2 + j' - j_1 - p_1 &= j_4 + j' - j_3 - p_2 = j_2 + j_4 - j'' - p_3 = n_1, \\ j_3 + j' - j_4 - p_1 &= j_1 + j' - j_2 - p_2 = j_1 + j_3 - j'' - p_3 = n_2, \\ j_3 + j'' - j_1 - p_1 &= j_4 + j'' - j_2 - p_2 = j_3 + j_4 - j' - p_3 = n_3, \\ j_2 + j'' - j_4 - p_1 &= j_1 + j'' - j_3 - p_2 = j_1 + j_2 - j' - p_3 = n_4. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Az összeg tagjainak száma eggyel nagyobb, mint a kvantumszámokból képezett tizenkét $j_2 + j' - j_1$ alakú kombináció legkisebbike; az összeg egyetlen tagra redukálódik, ha e kombinációk közül akár csak egy is eltűnik. Az összegezés paraméterének a megválasztása tetszésüinktől függ.

Térjünk vissza most az általános problémára, a

$$\begin{aligned} ([j_1 j_2] j_{12} [j_3 j_4] j_{34} j m | [j_1 j_3] j_{13} [j_2 j_4] j_{24} j m) &\equiv (-1)^{j_{12} + j_{24} - j_1 - j_4} \cdot \\ \cdot [(2j_{12} + 1)(2j_{34} + 1)(2j_{13} + 1)(2j_{24} + 1)]^{\frac{1}{2}} S(j_1 j_2 j_3 j_4; j_{12} j_{34} j_{13} j_{24}; j) \end{aligned} \quad (4.36)$$

transzformációs függvény kiszámítására. Az S együttható generátorfüggvényét a

$$\begin{aligned} &\Sigma \Phi_{j_1 j_2 j_{12}}(\alpha) \Phi_{j_3 j_4 j_{34}}(\beta) \Phi_{j_{12} j_{34} j}(\gamma) \Phi_{j_1 j_3 j_{13}}(\alpha') \cdot \\ &\cdot \Phi_{j_2 j_4 j_{24}}(\beta') \Phi_{j_{13} j_{24} j}(\gamma') S(j_1 j_2 j_3 j_4; j_{12} j_{34} j_{13} j_{24}; j) = \\ &= [1 + \alpha_3 \beta_3 \alpha'_3 \beta'_3 - \gamma_3 (\alpha'_3 \alpha_2 \beta_2 + \beta'_3 \alpha_1 \beta_1) - \gamma'_3 (\alpha_3 \alpha'_2 \beta'_2 + \beta_3 \alpha'_1 \beta'_1) - \\ &- \gamma_3 \gamma'_3 (\alpha_2 \beta_1 \alpha'_2 \beta'_1 + \alpha_1 \beta_2 \alpha'_1 \beta'_2) - \gamma_2 \gamma'_2 (\alpha_2 \alpha'_2 + \beta_3 \beta'_3 \alpha_1 \alpha'_1) - \gamma_1 \gamma'_1 (\beta_1 \beta'_1 + \alpha_3 \alpha'_3 \beta_2 \beta'_2) - \\ &- \gamma_1 \gamma'_2 (\beta_2 \alpha'_1 + \alpha_3 \beta'_3 \beta_1 \alpha'_2) + \gamma_2 \gamma'_1 (\alpha_1 \beta'_2 + \alpha'_3 \beta_3 \alpha_2 \beta'_1)]^{-2} \end{aligned} \quad (4.37)$$

képlet¹² adja meg, ahol az összegezés valamennyi j -re kiterjesztendő. A kapcsolatot az X együtthatóval

$$\begin{aligned} &\Sigma X(j_1 j_2 j_{12}; m_1 m_2 - m_{12}) X(j_3 j_4 j_{34}; m_3 m_4 - m_{34}) X(j_{12} j_{34} j; m_{12} m_{34} - m) \cdot \\ &\cdot X(j_1 j_3 j_{13}; m_1 m_3 - m_{13}) X(j_2 j_4 j_{24}; m_2 m_4 - m_{24}) X(j_{13} j_{24} j; m_{13} m_{24} - m) = \\ &= (-1)^{j_{34} + j_{13} + j_1 + j_4 + 2j} S(j_1 j_2 j_3 j_4; j_{12} j_{34} j_{13} j_{24}; j) \end{aligned} \quad (4.38)$$

fejezi ki (az összegezés valamennyi m -re vonatkozik), a W együttható speciális esete S -nek:

$$S(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j'' j' j''; 0) = [(2j' + 1)(2j'' + 1)]^{-1/2} W(j_1 j_2 j_3 j_4; j' j''). \quad (4.39)$$

Tekintettel az S együttható bonyolultságára, itt megelégszünk azon esetek tárgyalásával, amikor S kifejezhető a W -k segítségével. Ez mindazon esetekben megtehető, amikor az S együtthatóban fellépő kilenc kvantumszám valamelyike zérus; ez (4.39)-ből következik, valamint S azon szimmetriatulajdonságából, amely

¹² Ezt a (C 30) egyenlet segítségével kapjuk.

megengedi, hogy j helyén a többi kvantumszám akármelyike fellépjen. Eszerint akár a (4.37), akár a (4.38) képletből következik, hogy

$$\begin{aligned} & S(j_1 j_2 j_3 j_4; j_{12} j_{34} j_{13} j_{24}; j) = \\ & = (-1)^{j_{13}+j_{24}-j_1+j_2-j_3-j_4} S(j_{12} j_{13} j_{34} j_3; j_2 j_4 j j_{13}; j_{24}) = \\ & = (-1)^{j_{24}+j_{34}-j_{12}-j_2-j_4-j} S(j j_{12} j_{13} j_1; j_{34} j_3 j_{24} j_2; j_4); \end{aligned} \quad (4.40)$$

ezek kifejezik a mondott típusú nyolc permutációval szemben mutatott szimmetriát. A (4.39) képletből kapjuk:

$$\begin{aligned} & S(j_1 j_2 j_3 j_2; j_{12} j_{34} j_{13} 0; j_{13}) = \\ & = (-1)^{j_{13}-j_1-j_3} [(2j_2+1)(2j_{13}+1)]^{-\frac{1}{2}} W(j_1 j_{12} j_3 j_{34}; j_2 j_{13}), \end{aligned} \quad (4.41)$$

és

$$S(j_1 j_2 j_3 0; j_{12} j_{13} j_{13} j_2; j) = (-1)^{j_3-j_{12}-j} [(2j_2+1)(2j_3+1)]^{-\frac{1}{2}} W(j j_{12} j_{13} j_1; j_3 j_2). \quad (4.42)$$

Az utóbbi eredmény magában foglalja a három impulzusmomentum problémájának megoldását. A (4.42) képlet tartalma, ha azt a transzformációs függvény segítségével fejezzük ki, anélkül, hogy a zérus sajátértékű impulzusmomentumra explicit hivatkoznánk:

$$\begin{aligned} & ([j_1 j_2] j_{12} j_3 j m | [j_1 j_3] j_{13} j_2 j m) = \\ & = (-1)^{j_{12}+j_{13}-j_1-j} [(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)]^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_2 j_3 j; j_{12} j_{13}). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Valamivel egyszerűbb alakot¹³ kapunk, ha az 1, 2 indexeket felcseréljük egymással, s ugyanakkor a j_1 és j_{23} impulzusmomentumok összeadásának sorrendjét is megváltoztatjuk:

$$([j_1 j_2] j_{12} j_3 j m | j_1 [j_2 j_3] j_{23} j m) = [(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_2 j j_3; j_{12} j_{23}). \quad (4.44)$$

Megjegyezzük, hogy ezen eredményből (4.30) szerint speciálisan következik:

$$([j_1 j_2] j_3 j_3 0 | j_1 [j_2 j_3] j_1 0) = 1, \quad (4.45)$$

azaz: a három impulzusmomentum eredőjének zérus értékéhez tartozó sajátvektor független az összeadás módjától, feltéve, hogy az impulzusmomentumok sorrendjét megőrizzük. E sajátvektor egyik előállítás:

$$\Psi(j_1 j_2 j_3 0) = \sum_{m_3} [(2j_3+1)]^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_3+m_3} \Psi([j_1 j_2] j_3 - m_3 j_3 m_3); \quad (4.46)$$

így tehát

$$\begin{aligned} & (j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3 | j_1 j_2 j_3 0) = [(2j_3+1)]^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_3+m_3} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 - m_3) = \\ & = (-1)^{j_1+j_3-j_2} X(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3), \end{aligned} \quad (4.47)$$

tekintettel (3.40)-re. Eszerint az X együttható, melyet eredetileg két impulzusmomentum összeadásával kapcsolatban definiáltunk, itt mint a zérus eredőjű három impulzusmomentum jellemzője jelenik meg.

¹³ G. Racah, *Phys. Rev.* **63**, 367 (1943).

Ez a lehetőség, hogy a $\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 = \mathbf{I}$ egyenletet a $\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_3 = 0$ egyenlettel helyettesíthetjük, annak folyománya, hogy egy impulzusmomentum-operátor (-1) -szerese bizonyos értelemben szintén impulzusmomentum-operátor. A

$$\mathbf{I} \times \mathbf{I} = i\mathbf{I} \quad (4.48)$$

felcserélési összefüggésből következik:

$$(-\mathbf{I}) \times (-\mathbf{I}) = -i(-\mathbf{I}); \quad (4.49)$$

ha itt i előjelét ellentettre változtatjuk (azaz: képezzük a komplex — nem pedig az hermitikus — konjugáltat), visszakapjuk a (4.48) alakot. Eszerint

$$\mathbf{I}' = -\mathbf{I}^* \quad (4.50)$$

impulzusmomentum-operátor. A \mathbf{I}' operátor sajátvektorainak meghatározása céljából megjegyezzük, hogy az U forgásoperátor $i\mathbf{I}$ -nek, valamint a valós szögeknek a függvénye. Ennélfogva

$$U' = U^* \quad (4.51)$$

ugyanolyan függvénye \mathbf{I}' -nek, mint amilyen függvénye az U operátor \mathbf{I} -nek. Képezve az

$$U\Psi(jm') = \sum_m \Psi(jm)U_{mm'}^{(j)}, \quad (4.52)$$

egyenlet komplex konjugáltját, (2.41) segítségével kapjuk:

$$U'\Psi^*(jm') = \sum_m \Psi^*(jm)(-1)^{m-m'}U_{-m-m'}^{(j)}. \quad (4.53)$$

Így tehát \mathbf{J}' sajátvektorai:

$$\Psi'(jm) = (-1)^{j+m}\Psi^*(j-m). \quad (4.54)$$

Vegyük most tekintetbe, hogy a

$$(2j+1)^{-\frac{1}{2}} \sum_m \Psi(jm)\Psi^*(jm) \quad (4.55)$$

diád, melyet egyetlen impulzusmomentum sajátvektoraiból képeztünk, a koordináta-rendszer elforgatásakor változatlan marad, minthogy

$$\sum_{mm'm''} \Psi(jm')(jm'|U|jm)(jm|U^{-1}|jm'')\Psi^*(jm'') = \sum_m \Psi(jm)\Psi^*(jm). \quad (4.56)$$

Ennélfogva (4.54) felhasználásával levonhatjuk a következtetést, hogy a

$$(2j+1)^{-\frac{1}{2}} \sum_m \Psi(jm)(-1)^{j-m}\Psi'(j-m) \quad (4.57)$$

vektor két impulzusmomentum gömbszimmetrikus állapotát írja le, összhangban a (3.75) képlettel. Ez a legegyszerűbb példa, amellyel a (4.47) összefüggést megvilágíthatjuk.

5. Tenzoroperátorok

A $2j+1$ számú $T(jm)$ operátort j -edrendű ($=0, \frac{1}{2}, 1, \dots$) irreducibilis tenzoroperátornak nevezzük, ha koordináta-transzformáció esetén az

$$UT(jm')U^{-1} = \sum_{m=-j}^j T(jm)U_{mm'}^{(j)} \quad (5.1)$$

képletnek megfelelően transzformálódnak. Képezve ezen egyenlet hermitikus konjugáltját és felhasználva a (2.41) képletet, azt találjuk, hogy $i^{2m}T(j-m)^+$ ugyanúgy transzformálódik, mint $T(jm)$. Ezért az hermitikus konjugált T^\dagger tenzort a

$$T^\dagger(jm) = i^{2m}T(j-m)^+ \quad (5.2)$$

képlet segítségével definiáljuk. A tenzort, amely T^\dagger konjugáltja,

$$T^{\dagger\dagger}(jm) = i^{2m}(T^\dagger(j-m))^+ = i^{2m}(i^{-2m}T(jm))^+ = (-1)^{2m}T(jm) \quad (5.3)$$

vagy

$$T^{\dagger\dagger} = (-1)^{2j}T \quad (5.4)$$

adja meg. Ez azt mutatja, hogy hermitikus tenzorok: $T^\dagger = T$, csak egész j mellett léteznek¹⁴; ezekre fennáll:

$$T(jm) = (-1)^m T(j-m)^+ \quad (5.5)$$

Két tenzoroperátor szorzata a koordináta-rendszer elforgatásakor az

$$\begin{aligned} UT_1(j_1m'_1)T_2(j_2m'_2)U^{-1} &= (UT_1(j_1m'_1)U^{-1})(UT_2(j_2m'_2)U^{-1}) = \\ &= \sum_{m_1m_2} T_1(j_1m_1)T_2(j_2m_2)U_{m_1m'_1}^{(j_1)}U_{m_2m'_2}^{(j_2)} \end{aligned} \quad (5.6)$$

képlet szerint transzformálódik. A (3.80) összefüggésből következik, hogy

$$\sum_{m_1m_2} T_1(j_1m_1)T_2(j_2m_2)(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm) \equiv T(j_1j_2jm) \quad (5.7)$$

eleget tesz az

$$UT(j_1j_2jm')U^{-1} = \sum_m T(j_1j_2jm)U_{mm'}^{(j)} \quad (5.8)$$

egyenletnek, s így az j -edrendű irreducibilis tenzor.

Ha tenzoroperátorunkat impulzusmomentum-sajátvektorra alkalmazzuk, analóg módon kapjuk:

$$\begin{aligned} U(T(j_1m'_1)\Psi(j_2m'_2)) &= (UT(j_1m'_1)U^{-1})(U\Psi(j_2m'_2)) = \\ &= \sum_{m_1m_2} T(j_1m_1)\Psi(j_2m_2)U_{m_1m'_1}^{(j_1)}U_{m_2m'_2}^{(j_2)}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

úgyhogy

$$\sum_{m_1m_2} T(j_1m_1)\Psi(j_2m_2)(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm) \equiv \Phi(j_1j_2jm) \quad (5.10)$$

az

$$U\Phi(j_1j_2jm') = \sum_m \Phi(j_1j_2jm)U_{mm'}^{(j)} \quad (5.11)$$

¹⁴ Hasonlóképpen lehetetlen a (4.54) alatt megadott $\Psi'(jm)$ -et m minden értékére $\Psi(jm)$ -mel azonosítani, ha j fél-egész.

összefüggésnek tesz eleget; az tehát a kvantumszámok j, m értékeihez tartozó impulzusmomentum-sajátvektor.

Az utóbbi megállapításban bennefoglaltatik a tenzoroperátorok mátrixelemeinek függése a mágneses kvantumszámtól. Explicite bevezetve az állapotok maradéktalan jellemzéséhez szükséges kvantumszámokat, írhatjuk:

$$\sum_{qm'} T(kq) \Psi(\gamma' j' m') (kq j' m' | k j' j m) = \sum_{\gamma} \Psi(\gamma j m) (2j+1)^{-\frac{1}{2}} [\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j']; \quad (5.12)$$

itt a jelölés egyszerűsítése érdekében a tenzoroperátor-indexeket más betűkkel jelöltük. Az (5.12) összefüggésből következik, hogy¹⁵

$$\begin{aligned} (\gamma j m | T(kq) | \gamma' j' m') &= (2j+1)^{-\frac{1}{2}} [\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j'] (k j' j m | kq j' m') = \\ &= (-1)^{k-j'+m} [\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j'] X(jk j'; -mqm'). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Ezen eredmény alternatív levezetése céljából¹⁶ megjegyezzük, hogy

$$\begin{aligned} (\gamma j m | T(kq) | \gamma' j' m') &= (U \Psi(\gamma j m), U T(kq) U^{-1} U \Psi(\gamma' j' m')) = \\ &= \sum_{m'' q' m'''} (\gamma j m'' | T(kq') | \gamma' j' m''') (-1)^{m-m''} U_{-m''-m}^{(j)} U_{q' q}^{(k)} U_{m''' m'}^{(j')}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Integrálva ω szerint, (3.82) felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} &(\gamma j m | T(kq) | \gamma' j' m') = \\ &= \sum_{m'' q' m'''} (-1)^{m-m''} X(jk j'; -mqm') X(jk j'; -m'' q' m''') (\gamma j m'' | T(kq') | \gamma' j' m'''), \end{aligned} \quad (5.15)$$

ami megegyezik (5.13)-mal, ha

$$[\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j'] = \sum_{mqm'} (-1)^{j'-k-m} X(jk j'; -mqm') (\gamma j m | T(kq) | \gamma' j' m'). \quad (5.16)$$

Az hermitikusan konjugált tenzor definícióját felhasználva kapjuk:

$$\begin{aligned} (\gamma j m | T^\dagger(kq) | \gamma' j' m') &= i^{2q} (\gamma' j' m' | T(k-q) | \gamma j m)^* = \\ &= i^{2q} (-1)^{k-j+m'} [\gamma' j' | T^{(k)} | \gamma j]^* X(jk j'; -mqm'), \end{aligned} \quad (5.17)$$

vagy

$$[\gamma j | T^{(k)\dagger} | \gamma' j'] = i^{2j'-2j} [\gamma' j' | T^{(k)} | \gamma j]^*; \quad (5.18)$$

itt felhasználtuk az X együtthatók (3.45) és (3.46) alatt kifejezett tulajdonságait. Hermitikus tenzor esetén ez az eredmény a következőképpen fest:

$$[\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j'] = (-1)^{j-j'} [\gamma' j' | T^{(k)} | \gamma j]^*. \quad (5.19)$$

Ha a T_1, T_2 tenzoroperátorok (5.7) alatt ugyanazon dinamikai változókra vonatkoznak, írhatjuk:

$$(\gamma j m | T(k_1 k_2 kq) | \gamma' j' m') = (-1)^{k-j'+m} [\gamma j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'] X(jk j'; -mqm'), \quad (5.20)$$

¹⁵ A kapcsolat a szögletes zárójeles kifejezés és az R dolgozatban definiált analóg mennyiség között:

$$[\gamma j | T^{(k)} | \gamma' j'] = (-1)^{k+j-j'} (\gamma j || T^{(k)} || \gamma' j').$$

¹⁶ Ezt a módszert alkalmazza könyvében E. P. Wigner, „Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren” (Braunschweig, 1931), 263. old.

ahol, tekintettel az (5.16) képletre,

$$[\gamma j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'] = \sum_{mqm'} (-1)^{j'-k-m} X(jk j'; -mqm') (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) \cdot \sum_{\gamma'' j'' m''} (\gamma j m | T_1(k_1 q_1) | \gamma'' j'' m'') (\gamma'' j'' m'' | T_2(k_2 q_2) | \gamma' j' m'). \quad (5.21)$$

A mágneses kvantumszámokra vonatkozó összeg, mely négy X együtthatót tartalmaz, egy W koefficienssel azonosítható:

$$[\gamma j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'] = (2k+1)^{\frac{1}{2}} \sum_{\gamma'' j''} W(k_1 k_2 j j'; k j'') [\gamma j | T_1^{(k_1)} | \gamma'' j''] [\gamma'' j'' | T_2^{(k_2)} | \gamma' j']. \quad (5.22)$$

Ha T_1 és T_2 különböző dinamikai változókhoz tartozó tenzoroperátorok, úgyhogy

$$[T_1, \mathbf{I}_2] = [T_2, \mathbf{I}_1] = 0, \quad (5.23)$$

kapjuk:

$$(\gamma j_1 j_2 j m | T(k_1 k_2 k q) | \gamma' j'_1 j'_2 j' m') = (-1)^{k-j'+m} [\gamma j_1 j_2 j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'_1 j'_2 j'] X(jk j'; -mqm'). \quad (5.24)$$

Itt

$$[\gamma j_1 j_2 j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'_1 j'_2 j'] = \sum (-1)^{j'-k-m} X(jk j'; -mqm') \cdot (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) (j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2) (j'_1 j'_2 j' m' | j'_1 m'_1 j'_2 m'_2) \cdot (\gamma j_1 m_1 | T_1(k_1 q_1) | \gamma'' j'_1 m'_1) (\gamma'' j'_1 m'_1 | T_2(k_2 q_2) | \gamma' j'_2 m'_2); \quad (5.25)$$

az összegezés valamennyi m kvantumszámra kiterjesztendő. Ez a mágneses kvantumszámokra vonatkozó összeg, mely hat X együtthatót tartalmaz, egy S koefficienssel azonosítható:

$$[\gamma j_1 j_2 j | T^{(k)}(k_1 k_2) | \gamma' j'_1 j'_2 j'] = [(2j+1)(2j'+1)(2k+1)]^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_2+j'_1-j'-k_1+k} \cdot S(j_1 j_2 j'_1 j'_2; j j' k_1 k_2; k) \sum_{\gamma''} [\gamma j_1 | T_1^{(k_1)} | \gamma'' j'_1] [\gamma'' j'_1 | T_2^{(k_2)} | \gamma' j'_2]. \quad (5.26)$$

Néhány speciális eset, amelyben csupán W koefficiens lép fel:

$$[\gamma j_1 j_2 j | T^{(0)}(k_1 k_1) | \gamma' j'_1 j'_2 j'] = \left[\frac{2j+1}{2k_1+1} \right]^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_2-j'_1-j-k_1} W(j_1 j_2 j'_1 j'_2; j k_1) \sum_{\gamma''} [\gamma j_1 | T_1^{(k_1)} | \gamma'' j'_1] [\gamma'' j'_1 | T_2^{(k_1)} | \gamma' j'_2], \quad (5.27)$$

$$[\gamma j_1 j_2 j | T_1^{(k)} | \gamma' j'_1 j'_2 j'] = [(2j+1)(2j'+1)]^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_2+k-j_1-j'} W(j_1 j j'_1 j'; j_2 k) [\gamma j_1 | T_1^{(k)} | \gamma' j'_1], \quad (5.28)$$

és

$$[\gamma j_1 j_2 j | T_2^{(k)} | \gamma' j'_1 j'_2 j'] = [(2j+1)(2j'+1)]^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1+k-j'_2-j} W(j_2 j j'_2 j'; j_1 k) [\gamma j_2 | T_2^{(k)} | \gamma' j'_2]. \quad (5.29)$$

Ezekből az eredményekből további összefüggéseket kaphatunk az S és W együtt-hatók között. Illusztrációként azt az egyszerűbb esetet vesszük szemügyre, amikor csak W együtt-hatók lépnek fel. Szorozzuk össze a

$$T^{(0)}(k_1 k_1) = \sum_{q_1} (2k_1 + 1)^{-\frac{1}{2}} T_1(k_1 q_1) (-1)^{k_1 - q_1} T_2(k_1 - q_1) \quad (5.30)$$

és

$$T^{(0)}(k_2 k_2) = \sum_{q_2} (2k_2 + 1)^{-\frac{1}{2}} T_1(k_2 q_2) (-1)^{k_2 - q_2} T_2(k_2 - q_2) \quad (5.31)$$

skaláris operátorokat.¹⁷ Kapjuk:

$$T^{(0)}(k_1 k_1) T^{(0)}(k_2 k_2) = \sum_{q_1 q_2} [(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)]^{-\frac{1}{2}} T_1(k_1 q_1) T_1(k_2 q_2) \cdot (-1)^{k_1 + k_2 - q_1 - q_2} T_2(k_1 - q_1) T_2(k_2 - q_2); \quad (5.32)$$

$$T_1(k_1 q_1) T_1(k_2 q_2) = \sum_{kq} T_1(k_1 k_2 k q) (k_1 k_2 k q | k_1 q_1 k_2 q_2) \quad (5.33)$$

és

$$T_2(k_1 - q_1) T_2(k_2 - q_2) = \sum_{kq} T_2(k_1 k_2 k - q) (-1)^{k_1 + k_2 - k} (k_1 k_2 k q | k_1 q_1 k_2 q_2) \quad (5.34)$$

felhasználásával ez a

$$\begin{aligned} T^{(0)}(k_1 k_1) T^{(0)}(k_2 k_2) &= \\ &= \sum_{kq} [(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)]^{-\frac{1}{2}} T_1(k_1 k_2 k q) (-1)^{k - q} T_2(k_1 k_2 k - q) \equiv \\ &\equiv \sum_k \left[\frac{2k + 1}{(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} T^{(0)}([k_1 k_2] k [k_1 k_2] k) \end{aligned} \quad (5.35)$$

alakba írható. Kiszámítva ezen egyenlet mátrixelemét (5.22) és (5.27) segítségével, a

$$\begin{aligned} W(j_1 j_2 j_1'' j_2''; j k_1) W(j_1'' j_2'' j_1' j_2'; j k_2) &= \\ &= (-1)^{j_1'' + j_2'' - j} \sum_k (2k + 1) (-1)^{k_1 + k_2 - k} W(j_1 j_2 j_1' j_2'; j k) \cdot \\ &\quad \cdot W(k_1 k_2 j_1 j_1'; k j_1'') W(k_1 k_2 j_2 j_2'; k j_2'') \end{aligned} \quad (5.36)$$

összefüggést kapjuk.

Tenzoroperátorokat szerkeszthetünk a spin-keltő és elnyelő operátorokból. Induljunk ki az

$$e^{\zeta_+ (za^+) + \zeta_- [za]} = \sum_{kq\alpha} \varphi_{kq}(z) \varphi_{k\alpha}(\zeta) t(kq\alpha) \quad (5.37)$$

operátorból, melyet a (za^+) , $[za]$ felcserélhető mennyiségekből képeztünk. Unitér transzformációt alkalmazva kapjuk:

$$e^{\zeta_+ (za^+) + \zeta_- [za']} = \sum_{kq\alpha} \varphi_{kq}(z) \varphi_{k\alpha}(\zeta) U t(kq\alpha) U^{-1}, \quad (5.38)$$

ahol a transzformált keltő és elnyelő operátorokat (2.14) adja meg. A (2.19) összefüggés alapján írható:

$$(za'^+) = (z'a^+), \quad [za'] = [z'a], \quad z' = uz; \quad (5.39)$$

¹⁷ Itt T_1 és T_2 különböző dinamikai változók függvényei.

itt a második egyenlet annak folyománya, hogy a_- és a_+ ugyanúgy transzformálódik, mint a_+^* és $-a_-^*$. Eszerint (2.21) felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} e^{\zeta_+^*(za'^+) + \zeta_-[za']} &= \sum_{kq\alpha} \varphi_{kq}(uz) \varphi_{k\alpha}(\zeta) t(kq\alpha) = \\ &= \sum_{kq\alpha} U_{qq'}^{(k)} \varphi_{kq'}(z) \varphi_{k\alpha}(\zeta) t(kq\alpha). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Ezzel megmutattuk, hogy

$$U t(kq'\alpha) U^{-1} = \sum_q t(kq\alpha) U_{qq'}^{(k)}. \quad (5.41)$$

Képezve (5.37) hermitikus konjugáltját és elvégezve a $z_+^* \rightarrow z_-$, $z_-^* \rightarrow -z_+$, $\zeta_-^* \rightarrow \zeta_+$, $\zeta_+^* \rightarrow -\zeta_-$ helyettesítést, amely visszaállítja (5.37) eredeti alakját, kapjuk:

$$t(kq\alpha) = (-1)^{q+\alpha} t(k-q-\alpha)^+. \quad (5.42)$$

Ennek megfelelően az adjungált tenzort

$$t^\dagger(kq\alpha) = i^{2\alpha} t(kq-\alpha) \quad (5.43)$$

adja meg. A

$$\frac{(za^+)^{k+\alpha} [za]^{k-\alpha}}{[(k+\alpha)!(k-\alpha)!]^{\frac{1}{2}}} = \sum_q \varphi_{kq}(z) t(kq\alpha) \quad (5.44)$$

képletből kiolvashatjuk α jelentését: 2α a keltő és elnyelő operátorok számának különbsége. Ha tehát a $t(kq\alpha)$ operátort a j' kvantumszámú impulzusmomentum-sajátvektorra alkalmazzuk, az az

$$\alpha = j - j' \quad (5.45)$$

egyenlet által meghatározott j kvantumszámú sajátvektort eredményez.

A $t(kq\alpha)$ operátor mátrixelemeinek kiszámítása céljából vizsgáljuk meg a

$$\begin{aligned} &(e^{(xa^+)} \Psi_0, e^{\zeta_+(za^+) + \zeta_-[za]} \cdot e^{(ya^+)} \Psi_0) = \\ &= \sum_{jmj'm'kq\alpha} \varphi_{jm}(x^*) (jm | t(kq\alpha) | j' m') \varphi_{j'm'}(y) \varphi_{kq}(z) \varphi_{k\alpha}(\zeta) = e^{(x^*y) + \zeta_+(x^*z) + \zeta_-[zy]} \end{aligned} \quad (5.46)$$

kifejezést. Az $x_+^* \rightarrow x_-$, $x_-^* \rightarrow -x_+$ helyettesítés eredményeként ez a

$$\begin{aligned} \sum_{jmj'm'kq\alpha} (-1)^{j-m} \varphi_{j-m}(x) (jm | t(kq\alpha) | j' m') \varphi_{j'm'}(y) \varphi_{kq}(z) \varphi_{k\alpha}(\zeta) = \\ = e^{\zeta_-[zy] + [yx] - \zeta_+[xz]} \end{aligned} \quad (5.47)$$

alakot ölti; ezt összehasonlítva a (3.42) egyenlettel, kapjuk:

$$\begin{aligned} e^{\zeta_-[zy] + [yx] - \zeta_+[xz]} &= \sum_{jmj'm'kq} \varphi_{j-m}(x) \varphi_{kq}(z) \varphi_{j'm'}(y) \varphi_{k, j-j'}(\zeta) \cdot \\ &\cdot (-1)^{k+j-j'} \left[\frac{(j+j'+k+1)!}{(j+j'-k)!} \right]^{\frac{1}{2}} X(jkj'; -mqm'). \end{aligned} \quad (5.48)$$

Így tehát

$$(jm | t(kq\alpha) | j' m) = \delta_{\alpha, j-j'} (-1)^{k-j'+m} \left[\frac{(j+j'+k+1)!}{(j+j'-k)!} \right]^{\frac{1}{2}} X(jkj'; -mqm), \quad (5.49)$$

vagy

$$[j | t^{(k)}(\alpha) | j'] = \delta_{\alpha, j-j'} \left[\frac{(j+j'+k+1)!}{(j+j'-k)!} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.50)$$

Különösen érdekes az $\alpha=0$ (k egész) eset:

$$\frac{(za)^k [za]^k}{k!} = \sum_q \varphi_{kq}(z) t(kq0). \quad (5.51)$$

Fennáll:

$$-(za^+)[za] = \mathbf{a} \cdot \mathbf{I} \quad (5.52)$$

ahol \mathbf{a} nullvektor:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = 0, \quad (5.53)$$

melynek komponensei

$$\mathbf{a}_1 = -z_+^2 + z_-^2, \quad \mathbf{a}_2 = -i(z_+^2 + z_-^2), \quad \mathbf{a}_3 = 2z_+ z_-. \quad (5.54)$$

Jól ismert, hogy $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r})^k$, ahol \mathbf{r} helyzetvektort jelöl, k -adrendű gömbfüggvény:

$$\frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r})^k}{2^k k!} = \left[\frac{4\pi}{2k+1} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_q \varphi_{kq}(z) Y_{kq}(\mathbf{r}), \quad (5.55)$$

ahol a $Y_{kq}(\mathbf{r})$ gömbfüggvény magában foglalja az r^k tényezőt. Ennek megfelelően írhatjuk:

$$\frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{I})^k}{2^k k!} = \left[\frac{4\pi}{2k+1} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_q \varphi_{kq}(z) Y_{kq}(\mathbf{I}); \quad (5.56)$$

itt $Y_{kq}(\mathbf{I})$ az analóg $Y_{kq}(\mathbf{r})$ függvénytől csak abban különbözik, hogy lényeges a tényezők sorrendje. Ezt a jelölést felhasználva írhatjuk:

$$t(kq0) = \left[\frac{4\pi}{2k+1} \right]^{\frac{1}{2}} (-2)^k Y_{kq}(\mathbf{I}), \quad (5.57)$$

és

$$[j|Y^{(k)}(\mathbf{I})|j] = \left[\frac{2k+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2} \right)^k \cdot \left[\frac{(2j+k+1)!}{(2j-k)!} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.58)$$

Megjegyezzük még, hogy a $t(kq0)$ tenzor (5.43) értelmében hermitikus, úgyhogy az operátor-gömbfüggvényekre fennáll:

$$Y_{kq}(\mathbf{I})^+ = (-1)^q Y_{k-q}(\mathbf{I}). \quad (5.59)$$

Az

$$Y(k_1 k_2 k q) = \sum_{q_1 q_2} Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) \quad (5.60)$$

tenzoroperátor mátrixelemeit

$$[j|Y^{(k)}(k_1 k_2)|j] = (2k+1)^{\frac{1}{2}} W(k_1 k_2 j j; k j) [j|Y^{(k_1)}|j] [j|Y^{(k_2)}|j] \quad (5.61)$$

adja meg, tekintettel (5.22)-re. Ami az (5.60) operátornak a j kvantumszámmal jellemzett sajátvektorokra való hatását illeti, feljegyezzük az

$$Y(k_1 k_2 k q) = Y_{kq}(\mathbf{I}) \frac{[j|Y^{(k)}(k_1 k_2)|j]}{[j|Y^{(k)}|j]} \quad (5.62)$$

összefüggést; ez általános érvényű operátoregyenlet, ha $j(j+1)$ -et \mathbf{I}^2 -tel helyettesítjük.

Eszerint

$$\begin{aligned} \sum_{q_1 q_2} Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) = \\ = Y_{k q}(\mathbf{I}) (2k+1)^{\frac{1}{2}} W(k_1 k_2 j j; k j) \frac{[j | Y^{(k_1)} | j] [j | Y^{(k_2)} | j]}{[j | Y^{(k)} | j]}. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Ha $k=0$, kapjuk:

$$\sum_q Y_{k q}(\mathbf{I}) Y_{k q}(\mathbf{I})^+ = \frac{1}{2j+1} [j | Y^{(k)} | j]^2 = \frac{2k+1}{4\pi} \frac{1}{4^k} \frac{(2j+k+1)!}{(2j+1)(2j-k)!}; \quad (5.64)$$

itt felhasználtuk a

$$W(k k j j; 0 j) = (-1)^k [(2j+1)(2k+1)]^{-1/2} \quad (5.65)$$

egyenlőséget. Az (5.64) egyenlet jobboldalát könnyen előállíthatjuk $j(j+1)$ függvényeként; ily módon kapjuk a

$$\sum_q Y_{k q}(\mathbf{I}) Y_{k q}(\mathbf{I})^+ = \frac{2k+1}{4\pi} \{\mathbf{I}^2\}^k$$

operátoregyenletet, ahol

$$\{\mathbf{I}^2\}^k \equiv \prod_{n=0}^{k-1} \left[\mathbf{I}^2 - \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \right]. \quad (5.66)$$

A $\{\mathbf{I}^2\}^k$ operátort azon két követelmény jellemzi, hogy megsemmisít minden $j < \frac{1}{2}k$ kvantumszámhoz tartozó sajátvektort, és hogy j nagy értékeire \mathbf{I}^2 k -adik hatványába megy át.

Térjünk vissza az (5.63) képlethez, melyet most az

$$Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) = \left[\frac{(2k_1+1)(2k_2+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{k q} Y_{k q}(\mathbf{I}) f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}^2) (k_1 k_2 k q | k_1 q_1 k_2 q_2) \quad (5.67)$$

alakban írunk fel, ahol

$$\left[\frac{\{\mathbf{I}^2\}^k}{\{\mathbf{I}^2\}^{k_1} \{\mathbf{I}^2\}^{k_2}} \right]^{\frac{1}{2}} f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}^2) = (2j+1)^{\frac{1}{2}} W(k_1 k_2 j j; k j). \quad (5.68)$$

Az $Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I})$ szorzatra vonatkozó analóg egyenlet (5.67)-től csak a $(-1)^{k_1+k_2-k}$ tényezőben különbözik, amint az (3.47)-ből következik. Ezt a két egyenletet összeadva, majd kivonva kapjuk:

$$\begin{aligned} \{Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}), Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I})\} = \left[\frac{(2k_1+1)(2k_2+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \\ \cdot \sum_{\text{páros, } k q} Y_{k q}(\mathbf{I}) f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}^2) (k_1 k_2 k q | k_1 q_1 k_2 q_2) \end{aligned} \quad (5.69)$$

és

$$\begin{aligned} [Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}), Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I})] = \left[\frac{(2k_1+1)(2k_2+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \\ \cdot \sum_{\text{páratlan, } k q} Y_{k q}(\mathbf{I}) f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}^2) (k_1 k_2 k q | k_1 q_1 k_2 q_2), \end{aligned} \quad (5.70)$$

ahol a „páros” és „páratlan” megjelölés a $k_1 + k_2 - k$ kombinációra vonatkozik. Az utóbbi egyenlet kifejezi \mathbf{I} ezen operátorfüggvényeinek felcserélési tulajdonságait.

Az (5.70) képlet elemi alkalmazásaképpen képezzük annak átlósösszegét a j kvantum számú állapotokra vonatkozóan. Tekintettel arra, hogy a kommutátor átlósösszege zérus, azt kapjuk, hogy $Y_{kq}(\mathbf{I})$ átlósösszege eltűnik minden olyan k -ra, amely (5.70)-ben felléphet. Minthogy ezek a k értékek: $|k_1 - k_2| + 1, |k_1 - k_2| + 3, \dots, k_1 + k_2 - 1$, a

$$tr^{(j)} Y_{kq}(\mathbf{I}) = 0, \quad k > 0, \quad (5.71)$$

eredményt kapjuk.¹⁸ Ehelyett írható még:

$$\frac{1}{2j+1} tr^{(j)} Y_{kq}(\mathbf{I}) = \delta_{k0}. \quad (5.72)$$

Ezen eredmény felhasználásával (5.67) átlósösszege számára az

$$\frac{1}{2j+1} tr^{(j)} Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}) + Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) = \frac{1}{4\pi} \{j(j+1)\}^{k_1} \delta_{k_1 k_2} \delta_{q_1 q_2} \quad (5.73)$$

kifejezést kapjuk, ami kifejezi az operátor-gömbfüggvények ortogonalitását. Az (5.67) képletet megszorozva $Y_{k_3 q_3}(\mathbf{I})$ -vel kapjuk:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2j+1} tr^{(j)} Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}) Y_{k_3 q_3}(\mathbf{I}) = \\ & = \left[\prod_i \frac{2k_i + 1}{4\pi} \{j(j+1)\}^{k_i} \right]^{\frac{1}{2}} X(k; q) (-1)^{k_1 - k_2} (2j+1)^{\frac{1}{2}} W(k_1 k_2 j j; k_3 j). \end{aligned} \quad (5.74)$$

Hasonlítsuk össze ezt (3.85)-tel: a j kvantumszám nagy értékeinek határesetében

$$(-1)^{k_1 - k_2} (2j+1)^{\frac{1}{2}} W(k_1 k_2 j j; k_3 j) \rightarrow X(k_1 k_2 k_3; 000). \quad (5.75)$$

Áttérve most a két impulzusmomentumból képezett tenzoroperátorokra megkezdjük, hogy ami a j kvantumszámban átlós mátrixelemeket illeti,

$$\begin{aligned} & \sum_{q_1 q_2} Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}_1) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}_2) (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) = \\ & = Y_{kq}(\mathbf{I}) (2j+1) (2k+1)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1 + j_2 - j - k_1 + k} S(j_1 j_2 j_1 j_2; j j k_1 k_2; k) \cdot \\ & \quad \cdot \frac{[j_1 | Y^{(k_1)} | j_1] [j_2 | Y^{(k_2)} | j_2]}{[j | Y^{(k)} | j]}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

¹⁸ Ezt a tételt könnyű bebizonyítani tetszőleges tenzoroperátorra; (5.1) átlósösszegét kell képeznünk az adott j -vel jellemzett állapotokra vonatkozóan, majd integrálnunk ω -ra:

$$\sum_{m=-j}^j (jm | T(kq) | j'jm) = 0 \quad k > 0.$$

Természetesen k -nak egész számnak kell lennie, ha azt akarjuk, hogy az egyes mátrixelemek ne tűnjenek el.

A

$$\sum_q Y_{kq}(\mathbf{I}_1)^+ Y_{kq}(\mathbf{I}_2) = (-1)^{j_1+j_2-j} W(j_1 j_2 j_1 j_2; jk) [j_1 | Y^{(k)} | j_1] [j_2 | Y^{(k)} | j_2] \quad (5.77)$$

speciális példa esetében szükségtelen ez a korlátozás. A

$$\sum_q Y_{kq}(\mathbf{I}_1)^+ Y_{kq}(\mathbf{I}_2) = \frac{2k+1}{4\pi} P_k(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) \quad (5.78)$$

képlet által definiált Legendre-polinom segítségével ez az egyenlet a

$$[\{\mathbf{I}_1^2\}^k \{\mathbf{I}_2^2\}^k]^{-\frac{1}{2}} P_k(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) = (-1)^{j_1+j_2-j} (2j_1+1)^{\frac{1}{2}} (2j_2+1)^{\frac{1}{2}} W(j_1 j_2 j_1 j_2; jk) \quad (5.79)$$

alakban írható fel; ez egyben mutatja a jobboldal határértékét j_1, j_2 és j nagy értékei esetében. A $j=0$ mellett kapott egyszerű eredményt a

$$P_k(\mathbf{I}, -\mathbf{I}) = (-1)^k \{\mathbf{I}^2\}^k \quad (5.80)$$

alakban fejezhetjük ki.

A Legendre-operátorra vonatkozó szorzási tételt kapunk, ha megjegyezzük, hogy

$$\begin{aligned} \frac{2k_1+1}{4\pi} \frac{2k_2+1}{4\pi} P_{k_1}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) P_{k_2}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) = \\ = \sum_{k,q} (Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}_1) Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}_1))^+ Y_{k_1 q_1}(\mathbf{I}_2) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{I}_2); \end{aligned} \quad (5.81)$$

ennek alapján¹⁹

$$\begin{aligned} P_{k_1}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) P_{k_2}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) = \\ = \sum_k (2k+1) P_k(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) (-1)^{k_1+k_2-k} f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}_1^2) f_{k_1 k_2 k}(\mathbf{I}_2^2). \end{aligned} \quad (5.82)$$

Behelyettesítve ide a $k_2=1$ értéket, egyszerű rekurziós összefüggést nyerünk, amelynek segítségével a Legendre-operátorokat szukcesszíve meghatározhatjuk, kiindulva a

$$P_0(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) = 1 \quad (5.83)$$

kezdeti értékből. A rekurziós összefüggésben szereplő együtthatók a

$$\begin{aligned} W(k1jj; k+1j) = -W(k+11jj; kj) = \\ = \left[\frac{4j(j+1)-k^2-2k}{4j(j+1)(2j+1)} \frac{k+1}{(2k+1)(2k+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.84)$$

és

$$\sum_k (2k+1)(2j+1) [W(k1jj; kj)]^2 = 1 \quad (5.85)$$

egyenletekből számíthatók ki. Eszerint

$$\begin{aligned} f_{k1k+1}(\mathbf{I}^2) &= \left[\frac{k+1}{(2k+1)(2k+3)} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ f_{k1k-1}(\mathbf{I}^2) &= - \left[\frac{k}{(2k-1)(2k+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\mathbf{I}^2 - \frac{k^2-1}{4} \right), \\ (f_{k1k}(\mathbf{I}^2))^2 &= \frac{1}{4} \frac{k(k+1)}{2k+1}, \end{aligned} \quad (5.86)$$

¹⁹ Ez a két W együttható szorzatára vonatkozó tételre egy speciális példa [vö. (5.36)].

és így

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 + \frac{k(k+1)}{4} \right) P_k(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) = \\ & = \frac{k+1}{2k+1} P_{k+1}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) + \frac{k}{2k+1} \left(\mathbf{I}_1^2 - \frac{k^2-1}{4} \right) \left(\mathbf{I}_2^2 - \frac{k^2-1}{4} \right) P_{k-1}(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2). \end{aligned} \quad (5.87)$$

A (5.87) összefüggésből $k=0, 1, 2$ mellett a Legendre-operátorok számára a következő kifejezéseket kapjuk:

$$\begin{aligned} P_1(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) &= \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2, \\ P_2(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) &= \frac{3}{2} \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 \left(\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \mathbf{I}_1^2 \mathbf{I}_2^2, \\ P_3(\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2) &= \frac{5}{2} \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 \left(\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 + \frac{1}{2} \right) \left(\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 + \frac{3}{2} \right) - \frac{5}{6} \left(\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 + \frac{3}{2} \right) \mathbf{I}_1^2 \mathbf{I}_2^2 - \\ & - \frac{2}{3} \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 \left(\mathbf{I}_1^2 - \frac{3}{4} \right) \left(\mathbf{I}_2^2 - \frac{3}{4} \right). \end{aligned} \quad (5.88)$$

Eredményeink helyessége (5.80) segítségével célszerűen ellenőrizhető.

Az (5.62) képlethez hasonló összefüggés adható meg tetszőleges tenzoroperátorra vonatkozóan; ami a j -ben átlós mátrixelemeket illeti, fennáll:

$$T(kq) = Y_{kq}(\mathbf{I}) \frac{[j|T^{(k)}|j]}{[j|Y^{(k)}|j]}. \quad (5.89)$$

Az ezen összefüggésben szereplő együttható másféleképpen is kifejezhető. Írhatjuk:

$$\sum_q Y_{kq}(\mathbf{I})^+ T(kq) = Y_{kq}(\mathbf{I})^+ Y_{kq}(\mathbf{I}) \frac{[j|T^{(k)}|j]}{[j|Y^{(k)}|j]}; \quad (5.90)$$

ebből következik a

$$T(kq) \rightarrow \frac{4\pi}{2k+1} Y_{kq}(\mathbf{I}) \frac{1}{\{\mathbf{I}^2\}^k} \sum_{q'} Y_{kq'}(\mathbf{I})^+ T(kq') \quad (5.91)$$

projekciós szabály, mely a tenzoroperátor j -ben átlós részét izolálja. Kiindulhatunk a

$$(jj|T(k0)|jj) = (jj|Y_{k0}(\mathbf{I})|jj) \frac{[j|T^{(k)}|j]}{[j|Y^{(k)}|j]} \quad (5.92)$$

mátrixelemből is. Fennáll:

$$(jj|Y_{k0}(\mathbf{I})|jj) = (-1)^k [j|Y^{(k)}|j] X(jk; -j0j) = \left[\frac{2k+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^k} \frac{(2j)!}{(2j-k)!}, \quad (5.93)$$

úgyhogy a j -ben átlós mátrixelemeket illetően

$$T(kq) = \left[\frac{4\pi}{2k+1} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{kq}(\mathbf{I}) 2^k \frac{(2j-k)!}{(2j)!} (jj|T(k0)|jj). \quad (5.94)$$

A. Függelék

Ismertetünk egy módszert, mely egyszerre megadja az impulzusmomentum-operátorok sajátértékeit és sajátvektorait. Vegyük szemügyre ebből a célból a

$$V = \exp(i\chi \frac{1}{2} n + i\varphi I_3) \quad (A1)$$

unitér operátort, melynek sajátértékei: $\exp(ij\chi + im\varphi)$. A V operátor a

$$V = \sum_{jm} [\exp(ij\chi + im\varphi)] P(jm) \quad (A2)$$

alakban is felírható, ahol a $P(jm)$ projekciós operátor felírható a jelzett kvantum-számokhoz tartozó állapotvektorból képezett

$$P(jm) = \Psi(jm) \Psi(jm)^* \quad (A3)$$

diád alakjában. Eszerint ha V -t explicite meg tudjuk szerkeszteni az (A2) alakban, célunkat elértük.

Írjuk:

$$V = \exp(\frac{1}{2} i(\gamma_+ n_+ + \gamma_- n_-)),$$

$$\gamma_+ = \chi + \varphi, \quad \gamma_- = \chi - \varphi; \quad (A4)$$

innen a

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_\zeta} V = \frac{1}{2} i a_\zeta^+ a_\zeta V = \frac{1}{2} i \left[\exp\left(\frac{1}{2} i \gamma_\zeta\right) \right] a_\zeta^+ V a_\zeta \quad (A5)$$

differentiálegyenletet kapjuk, felhasználva a

$$V^{-1} a_\zeta V = (\exp(\frac{1}{2} i \gamma_\zeta)) a_\zeta \quad (A6)$$

relációt. Utóbbi differenciálással igazolható:

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_\zeta} V^{-1} a_\zeta V = \frac{1}{2} i V^{-1} [a_\zeta, n_\zeta] V = \frac{1}{2} i V^{-1} a_\zeta V, \quad (A7)$$

vagy pedig az

$$a_\zeta f(n_\zeta) = f(n_\zeta + 1) a_\zeta \quad (A8)$$

általános tételből kiindulva. Tekintettel az operátorok sorrendjére az (A5) képletben, a fenti egyenletek $\gamma_\zeta = 0$ esetén egyre redukálódó megoldását

$$V = \exp\{(e^{\frac{1}{2} i \gamma_+} - 1) a_+^+; a_+ + (e^{\frac{1}{2} i \gamma_-} - 1) a_-^+; a_-\} \quad (A9)$$

adja meg, ahol

$$\exp(\lambda a^+; a) = \sum \frac{\lambda^n}{n!} (a^+)^n (a)^n \quad (A10)$$

az exponenciális megfelelőképpen rendezett alakja. Ezt a megoldást a

$$V = \exp\left(\sum_\zeta e^{\frac{1}{2} i \gamma_\zeta} a_\zeta^+; P_0; a_\zeta\right) \quad (A11)$$

alakban írjuk fel; ezzel azt kívánjuk jelezni, hogy a

$$P_0 = \exp(-a_+^+; a_+ - a_-^+; a_-) = \exp(-(a^+; a)) \quad (A12)$$

operátort V rendezett kifejtésében a_ζ^+ és a_ζ hatványai közé kell beilleszteni:

$$V = \sum_{n_+, n_- = 0}^{\infty} \left\{ \exp \left[\frac{1}{2} i(n_+ \gamma_+ + n_- \gamma_-) \right] \right\} \frac{(a_+^+)^{n_+} (a_-^+)^{n_-}}{(n_+! n_-!)^{\frac{1}{2}}} P_0 \frac{(a_+)^{n_+} (a_-)^{n_-}}{(n_+! n_-!)^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{A13})$$

Megkaptuk tehát az (A2) alakot, ahol

$$j = \frac{1}{2}(n_+ + n_-), \quad m = \frac{1}{2}(n_+ - n_-), \quad n_+, n_- = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A14})$$

és

$$P(jm) = \varphi_{jm}(a^+) P_0 \varphi_{jm}(a); \quad (\text{A15})$$

itt a

$$\varphi_{jm}(a^+) = \frac{(a_+^+)^{j+m} (a_-^+)^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{A16})$$

jelölést alkalmaztuk. A

$$P_0 = \Psi_0 \Psi_0^* \quad (\text{A17})$$

képlettel definiált Ψ_0 sajátvektort felhasználva, az impulzusmomentum-sajátvektorokat a

$$\Psi(jm) = \varphi_{jm}(a^+) \Psi_0 \quad (\text{A18})$$

alakban írhatjuk fel. A $\Psi_0 = \Psi(00)$ sajátvektor alapvető tulajdonságát az

$$[a_\zeta, P_0] = (\partial/\partial a_\zeta^+) P_0 = -P_0 a_\zeta, \quad (\text{A19})$$

vagy az

$$a_\zeta P_0 = 0 \quad (\text{A20})$$

összefüggésből származtathatjuk le; eszerint

$$a_\zeta \Psi_0 = 0. \quad (\text{A21})$$

A sajátvektorok (1.16) alatt felírt egyszerű generátorfüggvényét ugyancsak megkaphatjuk, megjegyezve, hogy

$$(\Psi(jm), e^{(xa^+)} \Psi_0) = (\Psi_0, \varphi_{jm}(a) e^{(xa^+)} \Psi_0) = \varphi_{jm}(x). \quad (\text{A22})$$

Valóban,

$$e^{(xa^+)} \Psi_0 = \sum_{jm} \Psi(jm) (\Psi(jm), e^{(xa^+)} \Psi_0) = \sum_{jm} \varphi_{jm}(x) \Psi(jm). \quad (\text{A23})$$

B. Függelék

Az

$$A = \exp(za; a^+), \quad [a, a^+] = 1 \quad (\text{B1})$$

rendezett operátor eleget tesz az

$$[a, A] = (\partial/\partial a^+) A = zA, \quad (\text{B2})$$

$$[a^+, A] = -(\partial/\partial a) A = -Aza^+,$$

vagy

$$(1-z)aA = Aa, \quad a^+A = (1-z)Aa^+ \quad (\text{B3})$$

összefüggéseknek. Eszerint fennáll:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z} A &= a A a^+ = \frac{1}{1-z} A a a^+ = \frac{1}{1-z} A + \frac{1}{1-z} A a^+ a = \\ &= \frac{1}{1-z} A + \frac{1}{(1-z)^2} a^+ A a;\end{aligned}\quad (\text{B4})$$

ennek megoldása az

$$\exp(za; a^+) = \frac{1}{1-z} \exp\left(\frac{z}{1-z} a^+; a\right) \quad (\text{B5})$$

rendezett operátorazonosságot szolgáltatja. Ezen összefüggés

$$\exp(za; a^+) \cdot \Psi_0 = \frac{1}{1-z} \Psi_0, \quad a \Psi_0 = 0 \quad (\text{B6})$$

speciális következményét a szövegben közvetlenül levezettük [lásd (2.35)]. Az A operátor (B3) által kifejezett tulajdonságai az általános

$$\begin{aligned}\exp(za; a^+) \cdot f(a^+) &= \frac{1}{1-z} f\left(\frac{a^+}{1-z}\right) \exp\left(\frac{z}{1-z} a^+; a\right), \\ f(a) \exp(za; a^+) &= \exp\left(\frac{z}{1-z} a^+; a\right) \frac{1}{1-z} f\left(\frac{a}{1-z}\right)\end{aligned}\quad (\text{B7})$$

összefüggésekben is benne foglaltatnak.

Ezen azonosságok speciális esetei:

$$\exp(za; a^+) \cdot (a^+)^r = \frac{(a^+)^r}{(1-z)^{r+1}} \exp\left(\frac{z}{1-z} a^+; a\right) \quad (\text{B8})$$

és

$$a^r \exp(za; a^+) = \exp\left(\frac{z}{1-z} a^+; a\right) \frac{a^r}{(1-z)^{r+1}}. \quad (\text{B9})$$

Ezek a Laguerre-polinomok generátorfüggvényei operátoralakban felírva. Legyen $a^+ = x$, $a = \partial/\partial x$ és alkalmazzuk (B8) mindkét oldalát az e^{-x} függvényre. Ily módon kapjuk:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n x^{n+r} e^{-x} &= \frac{x^r}{(1-z)^{r+1}} \exp\left(\frac{z}{1-z} x; \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{-x} = \\ &= \frac{x^r}{(1-z)^{r+1}} \exp\left(-\frac{z}{1-z} x\right) e^{-x},\end{aligned}\quad (\text{B10})$$

vagy

$$\frac{\exp\left(-\frac{zx}{1-z}\right)}{(1-z)^{r+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n L_n^{(r)}(x), \quad (\text{B11})$$

ahol

$$L_n^{(r)}(x) = \frac{1}{n!} x^{-r} e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^n (x^{n+r} e^{-x}). \quad (\text{B12})$$

Hasonló eljárással a (B9) összefüggésből kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{n+r} x^n e^{-x} &= \exp \left(\frac{z}{1-z} x; \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^r}{(1-z)^{r+1}} e^{-x} = \\ &= \frac{(-1)^r}{(1-z)^{r+1}} \exp \left(-\frac{z}{1-z} x \right) e^{-x}; \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

ez mutatja (B12) és

$$L_n^{(r)}(x) = \frac{(-1)^r}{n!} e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{n+r} (x^n e^{-x}) \quad (\text{B14})$$

ekvivalenciáját.

A rendezett operátorazonosság egy másik példájában az

$$F_r(z) = r! z^{-r/2} I_r(2z^{1/2}) = \frac{r!}{2\pi i} \oint dt \frac{\exp \left(t + \frac{z}{t} \right)}{t^{r+1}} \quad (\text{B15})$$

hengerfüggvény lép fel [lásd (1.36)]. Kapjuk:

$$\begin{aligned} a^r F_r(za; a^+) &= \frac{r!}{2\pi i} \oint dt \frac{e^t}{t^{r+1}} a^r \exp \left(\frac{z}{t} a; a^+ \right) = \\ &= \frac{r!}{2\pi i} e^z \oint dt \frac{e^{t-z}}{(t-z)^{r+1}} \exp \left(\frac{z}{t-z} a^+; a \right) a^r = e^z F_r(za^+; a) a^r, \end{aligned} \quad (\text{B16})$$

és hasonlóképpen

$$F_r(za; a^+) (a^+)^r = e^z (a^+)^r F_r(za^+; a). \quad (\text{B17})$$

Ezekből az azonosságokból a Laguerre-polinomok

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{r!}{(n+r)!} z^n L_n^{(r)}(x) = e^z F_r(-zx) \quad (\text{B18})$$

generátorfüggvényét kapjuk.

C. Függelék

Ebben a szakaszban célunk a skaláris szorzatok egy osztályának a kiszámítása, amelyekre a legegyszerűbb példa:

$$T^{(2)} = (\exp(\lambda[a^+ b^+] + \xi_+(xa^+) + \xi_-(xb^+)) \Psi_0, \exp(\kappa[a^+ b^+] + \eta_+(ya^+) + \eta_-(yb^+)) \Psi). \quad (\text{C1})$$

Az ξ_+^* változó szerint differenciálva kapjuk:

$$\begin{aligned} (\partial/\partial\xi_+^*)T^{(2)} &= (e \dots \Psi_0, (x^*a)e \dots \Psi_0) = \\ &= \eta_+(x^*y)T^{(2)} + \kappa([xb]e \dots \Psi_0, e \dots \Psi_0), \end{aligned} \quad (C2)$$

vagy

$$(1 - \lambda^* \kappa)(\partial/\partial\xi_+^*)T^{(2)} = \eta_+(x^*y)T^{(2)}. \quad (C3)$$

Ennek megoldása:

$$T^{(2)} = \exp\left(\frac{(\xi_+^* \eta)(x^*y)}{1 - \lambda^* \kappa}\right) \cdot T_0^{(2)}, \quad (C4)$$

ahol

$$\begin{aligned} T_0^{(2)} &= (\exp(\lambda[a^+b^+])\Psi_0, \exp(\kappa[a^+b^+])\Psi_0) = (\Psi_0, \exp(\lambda^* \kappa(a^+; a))\Psi_0) = \\ &= \frac{1}{(1 - \lambda^* \kappa)^2}; \end{aligned} \quad (C5)$$

itt tekintetbe vettük (B6) egyszerű általánosítását:

$$\exp(z(a; a^+))\Psi_0 = \frac{1}{(1-z)^2}\Psi_0. \quad (C6)$$

Eszerint

$$T^{(2)} = \frac{1}{(1 - \lambda^* \kappa)^2} \exp\left(\frac{(\xi_+^* \eta)(x^*y)}{1 - \lambda^* \kappa}\right). \quad (C7)$$

Hasonló módon igazolható, hogy

$$\begin{aligned} &(\exp(\lambda[a^+b^+] + (x_1a^+) + (x_2b^+))\Psi_0, \exp(\kappa[a^+b^+] + (y_1a^+) + (y_2b^+))\Psi_0) = \\ &= \frac{1}{(1 - \lambda^* \kappa)^2} \exp\left(\frac{1}{1 - \lambda^* \kappa} \{(x_1^*y_1) + (x_2^*y_2) + \kappa[x_1^*x_2^*] + \lambda^*[y_1y_2]\}\right). \end{aligned} \quad (C8)$$

A skalárszorzatok azon osztályának, amelyre (C1) alatt adtunk példát, az általános tagja:

$$\begin{aligned} T^{(n)} &= (\exp(\tfrac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \lambda_{\mu\nu}[A_\mu^+ A_\nu^+] + \sum_\mu \xi_\mu(xA_\mu^+))\Psi_0, \\ &\exp(\tfrac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \kappa_{\mu\nu}[A_\mu^+ A_\nu^+] + \sum_\mu \eta_\mu(yA_\mu^+))\Psi_0), \end{aligned} \quad (C9)$$

ahol A_μ kétkomponensű operátort jelöl ($\mu = 1, 2, \dots, n$), mely az

$$[A_{\zeta\mu}, A_{\zeta'\nu}^+] = \delta_{\mu\nu} \delta_{\zeta\zeta'} \quad (C10)$$

összefüggéseknek tesz eleget, $\lambda_{\mu\nu}$ és $\kappa_{\mu\nu}$ pedig antiszimmetrikus mátrixok. Ugyan-ezen eljárást alkalmazva kapjuk:

$$\begin{aligned} (\partial/\partial\xi_\mu^*)T^{(n)} &= (e \dots \Psi_0, (x^*A_\mu)e \dots \Psi_0) = \\ &= \eta_\mu(x^*y)T^{(n)} + \sum_\nu \kappa_{\mu\nu}([xA_\nu]e \dots \Psi_0, e \dots \Psi_0); \end{aligned} \quad (C11)$$

eszerint

$$(\partial/\partial\xi_\mu^*)T^{(n)} + \sum_\beta \kappa_{\mu\beta} \lambda_{\beta\nu}^* (\partial/\partial\xi_\nu^*)T^{(n)} = \eta_\mu(x^*y)T^{(n)}. \quad (C12)$$

Ennek az egyenletnek a megoldását mátrixjelölés alkalmazásával a

$$T^{(n)} = \exp \left[(x^* y) \sum_{\mu\nu} \xi_{\mu}^* \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\mu\nu} \eta_{\nu} \right] T_0^{(n)} \quad (C13)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$T_0^{(n)} = (\exp(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \lambda_{\mu\nu} [A_{\mu}^+ A_{\nu}^+]) \Psi_0, \exp(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \kappa_{\mu\nu} [A_{\mu}^+ A_{\nu}^+]) \Psi_0) = (\Psi_0, Q \Psi_0) \quad (C14)$$

és

$$Q = \exp(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \lambda_{\mu\nu}^* [A_{\mu} A_{\nu}]) \cdot \exp(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \kappa_{\mu\nu} [A_{\mu}^+ A_{\nu}^+]). \quad (C15)$$

A $T_0^{(n)}$ operátor kiszámításához Q következő tulajdonságait használjuk fel:

$$(\partial/\partial \lambda_{\mu\nu}^*) Q = [A_{\mu} A_{\nu}] Q, \quad (C16)$$

valamint

$$[xA_{\mu}] Q - Q[xA_{\mu}] = -Q \sum_{\nu} \kappa_{\mu\nu} (xA_{\nu}^+), \quad (C17a)$$

$$Q(xA_{\mu}^+) - (xA_{\mu}^+) Q = \sum_{\nu} \lambda_{\mu\nu}^* [xA_{\nu}] Q, \quad (C17b)$$

ahol x tetszőleges konstans spinor. A (C17a), (C17b) képleteket kombinálva kapjuk:

$$\sum_{\nu} (1 + \kappa \lambda^*)_{\mu\nu} [xA_{\nu}] Q = Q[xA_{\mu}] - \sum_{\beta} \kappa_{\mu\beta} (xA_{\beta}^+) Q \quad (C18)$$

vagy

$$[xA_{\nu}] Q = \sum_{\nu\beta} \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\beta} Q[xA_{\beta}] - \sum_{\nu\beta} \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\beta} \kappa_{\nu\beta} (xA_{\beta}^+) Q. \quad (C19)$$

Ennélfogva

$$\begin{aligned} [A_{\mu} A_{\nu}] Q &= \sum_{\beta} \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\beta} [A_{\mu} Q A_{\beta}] - \sum_{\beta} \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\beta} (A_{\beta}^+ A_{\mu}) Q - \\ &\quad - 2 \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\mu} \kappa Q; \end{aligned} \quad (C20)$$

innen kapjuk ($A_{\mu} \Psi = 0$):

$$(\partial/\partial \lambda_{\mu\nu}^*) T_0^{(n)} = -2 \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \right)_{\nu\mu} T_0^{(n)}. \quad (C21)$$

A λ^* mátrixot $\delta \lambda^*$ -gal megváltoztatva írhatjuk:

$$\delta \log T_0^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \delta \lambda_{\mu\nu}^* (\partial/\partial \lambda_{\mu\nu}^*) \log T_0^{(n)} = -tr \left(\frac{1}{1 + \kappa \lambda^*} \kappa \delta \lambda^* \right). \quad (C22)$$

Összehasonlítva ezt a determináns

$$\delta \log |A| = tr (A^{-1} \delta A) \quad (C23)$$

differenciálási szabályával kapjuk a kívánt

$$T_0^{(n)} = \frac{1}{|1 + \kappa \lambda^*|} \quad (C24)$$

kifejezést.

A (C13) kifejezés segítségével $T_0^{(n)}$ számára rekurziós összefüggést is nyerhetünk. Valóban,

$$\begin{aligned} T_0^{(n)} &= \left(\exp \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^{n-1} \lambda_{\mu\nu} [A_\mu^+ A_\nu^+] + \sum_{\mu\nu=1}^{n-1} \lambda_{n\mu} [A_n^+ A_\mu^+] \right) \Psi_0, \right. \\ &\quad \left. \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^{n-1} \kappa_{\mu\nu} [A_\mu^+ A_\nu^+] + \sum_{\mu\nu=1}^{n-1} \kappa_{n\mu} [A_n^+ A_\mu^+] \right) \Psi_0 \right) = \\ &= \left(\Psi_0, \exp \left((A_n; A_n^+) \sum_{\mu\nu} \lambda_{n\mu}^* \left(\frac{1}{1 + \kappa' \lambda'^*} \right)_{\mu\nu} \kappa_{n\nu} \right) \Psi_0 \right) T_0^{(n-1)} = \\ &= \left[1 - \sum_{\mu\nu} \lambda_{n\mu}^* \left(\frac{1}{1 + \kappa' \lambda'^*} \right)_{\mu\nu} \kappa_{n\nu} \right]^{-2} T_0^{(n-1)}, \end{aligned} \quad (C25)$$

ahol κ' és λ' $(n-1)$ -dimenziós mátrixot jelöl.

A $T_0^{(n)}$ operátor tényleges megszerkesztése részletes számítások nélkül elvégezhető. A (C24), (C25) képletekből következik, hogy $T_0^{(n)}$ a λ^* és κ mátrixok komponenseiből képezett hatványsor reciprok négyzete; a sor utolsó tagja, $(-1)^{\frac{1}{2}n} |\lambda^*|^{\frac{1}{2}} |\kappa|^{\frac{1}{2}}$ páratlan n esetén eltűnik. A

$$T_0^{(2)} = [1 - \lambda_{12}^* \kappa_{12}]^{-2} = [1 - |\lambda^*|^{\frac{1}{2}} |\kappa|^{\frac{1}{2}}]^{-2} \quad (C26)$$

kifejezésből indulunk ki. Azt találjuk, hogy $T_0^{(3)}$ ugyanilyen szerkezetű; módosulást az eggyel nagyobb dimenziószám okoz:

$$T_0^{(3)} = [1 - (\lambda_{12}^* \kappa_{12} + \lambda_{23}^* \kappa_{23} + \lambda_{31}^* \kappa_{31})]^{-2} = \left[1 - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^3 \lambda_{\mu\nu}^* \kappa_{\mu\nu} \right]^{-2}, \quad (C27)$$

és így

$$T_0^{(4)} = \left[1 - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^4 \lambda_{\mu\nu}^* \kappa_{\mu\nu} + |\lambda^*|^{\frac{1}{2}} |\kappa|^{\frac{1}{2}} \right]^{-2}, \quad (C28)$$

ahol

$$|\lambda|^{\frac{1}{2}} = \lambda_{12} \lambda_{34} + \lambda_{23} \lambda_{14} + \lambda_{31} \lambda_{24} \quad (C29)$$

$$= \frac{1}{8} \sum_{\mu\nu\sigma\tau=1}^4 \varepsilon_{\mu\nu\sigma\tau} \lambda_{\mu\nu} \lambda_{\sigma\tau},$$

ε pedig a teljesen antiszimmetrikus szimbólum. Az általános eljárás bemutatására utolsó példaként a

$$T_0^{(5)} = \left[1 - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^5 \lambda_{\mu\nu}^* \kappa_{\mu\nu} + \sum_{\alpha=1}^5 (\lambda^*)_{\alpha} (\kappa)_{\alpha} \right]^{-2} \quad (C30)$$

kifejezést közöljük, mely (C28) általánosítása; itt

$$(\lambda)_{\alpha} = \frac{1}{8} \sum_{\mu\nu\sigma\tau=1}^5 \varepsilon_{\mu\nu\sigma\tau} \lambda_{\mu\nu} \lambda_{\sigma\tau}. \quad (C31)$$

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. I. 18. — Terjedelem 9,40 (A/5) ív
71-306 — Szegedi Nyomda

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Lovas István:</i> Rezonancia-jelenségek a magreakciókban	209

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>J. Schwinger:</i> Az impulzusmomentumról	267
---	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

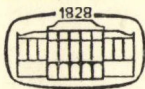
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ELJÁRÁS IGEN GYENGÉN ABSZORBEÁLÓ ÉS FÉNYSZÓRÓ KÖZEGEK SPEKTROFOTOMETRIAI VIZSGÁLATÁRA*

KETSKEMÉTY I., KOZMA L., FARKAS É., RÁCZ B.

József Attila Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézete, Szeged

A jelen dolgozatban a szerzők rövid összefoglalást nyújtanak a gyengén abszorbeáló közegek spektrofotometriai vizsgálatainál fellépő nehézségekről és áttekintik azokat az eljárásokat, amelyekkel ilyen vizsgálatokat végeztek. Szükségessé vált egy olyan kísérleti eljárás kidolgozása, amellyel az említett gyengén abszorbeáló közegek lumineszcencia-jellemzői nagy pontossággal meghatározhatók. A dolgozatban leírunk egy speciális gömbküvettra alapozott mérési eljárást, amellyel ezek a feladatok megoldhatók. A mérőmódszer kidolgozása során végzett számítások alapjainak ismertetése után az oldat egyes optikai, ill. fluoreszcencia-jellemzőknek a közvetlen mért mennyiségekből való meghatározására vonatkozó formulákat adják meg. Az eljárás alkalmazhatóságát a hagyományos spektrofotometriai módszerekkel vizsgálható koncentrációknál 3—4 nagyságrenddel kisebb koncentrációjú oldatokon végzett nagyobb számú méréssel támasztják alá. Az eredmények egyértelműen bizonyítják a módszer megbízhatóságát még fényszóró közegek esetében is.

1. A spektrofotometriai vizsgálatok során már régebben felmerült a gyengén abszorbeáló közegek tanulmányozásának igénye. Korábban ilyen közegek abszorpciós színképének felvétele hosszú, vagy pedig rövid, de a fényút megnövelését tükrrendszerrel biztosító küvetákkal [1], a fluoreszcencia emisszió vizsgálata pedig az emittált fény tükrökkel való gyűjtésével vagy nagy teljesítményű gerjesztő fényforrás alkalmazásával történt. Az említett megoldások egyike sem alkalmazható a laboratóriumokban használatos gyári spektrofotométereknél. A hosszú küveták emellett nagy mennyiségű anyagfelhasználást igényelnek és alkalmazásuk jelentős optikai nehézségeket okoz. Ez utóbbi még fokozottabban érvényes a fényterelő tükrökkel ellátott küvetákra.

Fényszóró közegek spektrofotometriai vizsgálatánál nagy nyílásszögű leképezést, megfelelően elhelyezett tejüveget vagy fotokatódot, integráló gömböt alkalmazunk a mérőfény eredeti irányától eltérített fénysugarak összegyűjtésére. Ezek az eljárások azonban a legjobb esetben is csupán a küvetta fala által határolt féltér-szögbe szórt sugarakat gyűjtik össze, s így a mérési eredmények csak közelítő értékek tekinthetők. Szokásos a fényszórás figyelembevételre korrekciós formulákkal is, azonban ezek alkalmazhatósági feltételei nehezen tarthatók be.

Jelen dolgozatban részletes mérési eredményeket kívánunk bemutatni, egy olyan korábban közölt [2] új mérési eljárásra vonatkozóan, amellyel a vizsgálható koncentráció tartomány 3—4 nagyságrenddel csökkenthető a hagyományos eljárásokkal szemben, és emellett, ha az anyag fényszóró, a tér bármely irányában lejátszódó fényszórás zavaró hatását teljesen kiküszöböli.

* Érkezett 1970. október 1.

A [2]-ben leírt mérő módszer a következő. A vizsgálandó anyagot (folyadék, gőz, gáz, stb.) egy, a preparátum betöltésére szolgáló nyílással és a fény be- és kivezetéséhez szükséges ablakokkal ellátott integráló gömbbe helyezük el úgy, hogy az anyag a gömb belsejét teljes egészében kitöltse. A gömb fala polírozott fém, vagy kívülről ezüst réteggel, MgO, ill. egyéb tükröző vagy diffúzan reflektáló réteggel bevont optikailag átlátszó üveg, kvarc, esetleg műanyag.

Abban az esetben, ha időben állandó N_e intenzitású fénnel sugározzuk be a vizsgálati teret és teljesül a $k(v)r < 10^{-2}$ feltétel — $k(v)$ az abszorpciókoefficiens, r a gömb sugara, v a fény frekvenciája —, akkor kísérleti tapasztalataink szerint a sokszoros reflexió következtében n_v sűrűségű homogén és izotróp fotongáznak tekinthető sugárzási tér alakul ki a gömbküvetta belsejében. n_v -re fennáll a

$$\frac{4\pi}{3} r^3 \frac{dn_v}{dt} = N_e - N_a - N_r - N_m \quad (1)$$

összefüggés, ahol N_a , N_r , ill. N_m jelenti rendre a közegben az abszorpció, a felületen való nem teljes reflexió, ill. a reflektáló felület m területű nyílásain való távozás következtében fellépő fotonszám-változás sebességét. Könnyű belátni, hogy

$$N_a = \frac{4\pi}{3} r^3 n_v c n^{-1} k(v), \quad N_r = \pi r^2 c n^{-1} n_v (1 - R_v) \quad \text{és} \quad N_m = \frac{1}{4} m c n^{-1} n_v,$$

itt c a fény terjedési sebessége, n a vizsgált közeg törésmutatója, R_v a reflektáló felület reflexiókoefficiense. Az (1) egyenletből adódik, hogy

$$n_v = \frac{n N_e \left| \frac{4r^3 \pi}{3} \right|}{c k(v) + \frac{3}{4r} c (1 - R_v) + \frac{3}{16\pi r^3} m c} \quad (2)$$

Az *abszorpciókoefficiens* oldatok esetében úgy határozható meg, hogy a küvetát megtöltjük oldószerrel, ill. oldattal és mérjük — N_e konstans értéke mellett — az ablakon keresztül kilépő N_0 , ill. N fényintenzitásokat egy fotoelektron-sokszorozó segítségével. Tekintve, hogy az ablakon kilépő fény intenzitása arányos a gömbben levő fotongáz sűrűségével, a (2) összefüggés egyszerű számításokkal átírható a következő egyszerű formába

$$k(v) = A \left(\frac{I_0}{I} - 1 \right), \quad (3)$$

ahol A a küvetta adatait tartalmazó állandó, I_0 és I a fotoelektron-sokszorozó fotoáramai, amelyek arányosak a fotokatódra jutó N_0 és N fényintenzitásokkal. A fent említett számítások szerint gömbküvetta A az

$$A = \frac{4}{3r} (1 - R_v) + \frac{3}{16\pi r^3} m \quad (4)$$

összefüggés alapján adható meg.

A *fluoreszcencia-színkép* meghatározására szolgáló eljárás a következőkön alapszik. Amennyiben a közeg lumineszcenciára képes, a v frekvenciájú gerjesztő

fotongáz jelenléte következtében a gömbben lumineszcencia fotongáz is kialakul, amely az abszorpciós koeficiens eléggé kicsiny értékei esetében szintén homogén és izotrop. Jelöljük a lumineszcencia-fotongáz sűrűségét n' -vel, valódi spektrális eloszlását pedig $f(v')$ -vel. Könnyű belátni, hogy időben állandó gerjesztő intenzitás mellett n' -re fennáll a

$$\frac{d}{dt} V n' f^*(v') \Delta v' = N_f f(v') - N_{fr}(v') \Delta v' - N_{fm}(v') \Delta v' - \frac{c}{n} n' V f^*(v') \Delta v' k(v') = 0 \quad (5)$$

egyenlőség, ahol N_f jelenti a küvetében időegység alatt keletkező összes lumineszcencia fotonok számát, $f^*(v)$ a gömbben levő lumineszcencia fény spektrális eloszlását, $\Delta v'$ az emissziós színek kicsiny frekvencia-intervallumát. A jobb oldal második tagja a nem tökéletes reflexió miatti, a harmadik tag a be nem vont felületdarabokon való kilépés miatti fotonszámváltozási sebességet veszi számba, a negyedik tag pedig a gömbben levő lumineszcenciafény reabszorpció miatti gyengülését adja meg. Könnyen belátható, hogy $N_{fm}(v') = \frac{1}{4} m n' f^*(v') \frac{c}{n}$, ill. $N_{fr}(v') = \pi r^2 n' f^*(v') \cdot$

$\cdot (1 - R_v) \frac{c}{n}$. Az (5) összefüggésből az

$$f(v') = \frac{n' c f^*(v')}{n N_a \eta(v)} \left[\frac{m}{4} + \pi r^3 (1 - R_v) + \frac{4\pi}{3} r^3 k(v') \right] \quad (6)$$

egyenlőség adódik, amely alapján a gömb ablakán át megfigyelt $f^*(v')$ külső fluoreszcencia színekéből kiszámítható az $f(v')$ belső fluoreszcencia színeké. Könnyű belátni, hogy (6) a közvetlenül mért fotoáram intenzitásokkal az

$$f(v') = C \frac{I_{0v'}}{I_{v'}} I_{fv'} Q_{v'} \quad (7)$$

alakban írható, ahol $I_{fv'}$ a fluoreszcencia fény által létrehozott fotoáram, $I_{0v'}$, ill. $I_{v'}$ az oldószerezrel, ill. oldattal töltött gömbből az ablakon át kilépő, v' frekvenciájú fény által létrehozott (az abszorpció mérésével kapcsolatban definiált) fotoáram, $Q_{v'}$, pedig a készülék spektrális érzékenységet megadó függvény.

A (6) egyenlet a *hatásfok* meghatározására is lehetőséget nyújt. Az abszolút kvantumhatásfok meghatározása csak viszonylag kis pontossággal lehetséges, részben a szekunder-fluoreszcencia hatása miatt, részben a féltérszögbe kilépő fotonfluxus nehéz mérhetősége miatt.

Kimutatható viszont, hogy a relatív hatásfok az

$$\eta(\lambda) = \frac{I_f(\lambda)}{I_g(\lambda)} \frac{1}{Q(\lambda)} \left(1 + \frac{1}{\frac{I_0}{I} - 1} \right) \quad (8)$$

formula alapján pontosabban meghatározható. Itt I_f , ill. I_g a fluoreszcencia, ill. a gerjesztő fény által kiváltott fotoáram intenzitás, $Q(\lambda)$ a gerjesztő fény intenzitását mérő fotoelektronsokszorozó fotoárama és a beeső energia közötti kapcsolatot megadó függvény, amelyet pl. a [3]-ban leírt módon határozhatunk meg, I_0 és I az abszorpció mérésnél definiált fotoáramok.

A fluoreszcencia *csillapodási idejének* meghatározásához a következő megmondások alapján juthatunk. Ha a gömbbe a stationárius N_e intenzitású gerjesztő fénysugárral kívül modulált, $N(t) = N \sin \omega t$ intenzitású fluxus is belép, akkor a gömbben levő fotongázsűrűség időtől függő $n(v)$ -részére (1) helyett a

$$\frac{dn_v}{dt} = N \sin \omega t - n_v \frac{c}{n} k_v = \frac{3}{4r} \frac{c}{n} (1 - R_v) n_v \quad (9)$$

összefüggést nyerjük. Egyszerű, de hosszadalmas számításokkal a fluoreszcencia-fotongáz $n(v)$ sűrűségére az

$$n(t) = \text{const} \sin \omega(t - \tau' - \tau'' - \tau) \quad (10)$$

összefüggés adódik, amelyben τ a fluoreszcencia csillapodási ideje, τ' és τ'' a gerjesztő, ill. a fluoreszcencia-fotonoknak a gömbben való átlagos bolyongási ideje.

A τ csillapodási idő meghatározása a következő módon lehetséges. Fluoriméter segítségével mérjük a (10)-ben szereplő $\tau + \tau' + \tau''$ fáziskésési időt, és ebből levonjuk a gerjesztő fotonok és a fluoreszcencia fotonok τ' és τ'' kísérletileg mérhető bolyongási idejét.

Fluorimetriás mérések adatai szerint 5–10 cm átmérőjű gömbküvetekben a gerjesztő fotonok átlagos bolyongási ideje néhány n sec, azaz a gömbön belüli fénypáthossz néhány méter. A $10^{-7} - 10^{-9}$ mol/l koncentrációjú szerves festékkoldatokon végzett τ -mérések eredményei igen jó egyezésben vannak a nagy koncentrációknál kapottakkal.

Mielőtt a fenti módszerrel végzett mérések eredményeit bemutatnánk, néhány általános megjegyzést teszünk. a) A küvetta belső falán létrejövő többszörös reflexió következtében alakul ki a homogén fotongáz. Amennyiben a vizsgált közeg fényszóró, úgy a folyadék belsejében létrejövő fényszórások elősegítik a fotonok diffúz eloszlását. A közeg fényszórása így nem okoz az (1), (5) és (9) kifejezésekben számításba vett veszteségekkel szemben újabbakat, s így a megfigyelő ablakon távozó fénynyalábra nem kell semmilyen fényszórásra vonatkozó korrekciót alkalmazni. b) A kísérleti eredmények tapasztalatai szerint a fent leírt módszernél az edény térfogata játszik fontos szerepet, alakja másodlagos, a kvantitatív tárgyalásnál azonban célszerű a gömb alakot előnyben részesíteni. c) Mivel a leírt módszer igen gyenge abszorpció esetén alkalmazható — erősebb abszorpciónál homogén fotongáz nem alakul ki —, nagyobb, 5–10 cm átmérőjű küvetákkal mérések végezhetők abban az esetben is, ha igen kicsiny anyagmennyiség áll rendelkezésre, ugyanis az oldat hígítása különben sem kerülhető el.

2. A fent leírt eljárás kísérleti ellenőrzésére vonatkozó vizsgálatainkat az 1. ábrán vázolt berendezéssel végeztük. Az F fényforrást (12 V-os, 35 W-os izzólámpa, ill. HBO 200 típusú higanylámpa) az L_1 lencse képezi le az M_1 monokromátor belépő részére. A monokromátorból kilépő, közel monokromatikus sugárnyalábot az L_2 lencse juttatja a G küvetába. G falán levő, a fény ki- és bevezetésére szolgáló 2–3 mm átmérőjű, kör alakú ablakok két egymásra merőleges sugár mentén helyezkednek el. A belépő nyílást L_2 fókuszpontjába helyezve biztosítható, hogy ilyen kicsiny ablak esetén is a fénysugár csak az ablak területére essen. Az U üveglap a gerjesztő fény egy részét a Ph_2 fotoelektron-sokszorozóra juttatja, s így a gömbbe belépő fény intenzitásának időbeni állandósága ellenőrizhető.

Abszorpció méréseknél gyengén vagy egyáltalán nem lumineszkáló közegек esetében, a gömbből kilépő fény intenzitásának mérésére szolgáló Ph_1 fotoelektron-sokszorozó fotokatódját közvetlenül a kilépő nyílás elé helyezhetjük el. Oldószerrel, ill. oldattal töltve meg G -t, és mérve az I_0 , ill. I fotoáramokat különböző hullámhosszak esetén (3) alapján az abszorpciós együttható kiszámítható. A formulában szereplő A tényező értékét vagy (4) alapján, vagy pedig kísérletileg határozhatjuk meg a következőképpen. Olyan anyagoknál, amelynél a Beer—Lambert törvény érvényes, nagyobb koncentrációk esetében meghatározva a moláris extinkciós koefficiens értékét, a $k(\lambda)$ értékek megadhatók a vizsgálandó kicsiny koncentrációk tartományához tartozó oldatokhoz is. Így (3)-ból $k(\lambda)$, $I_0(\lambda)$ és $I(\lambda)$ segítségével A számítható.

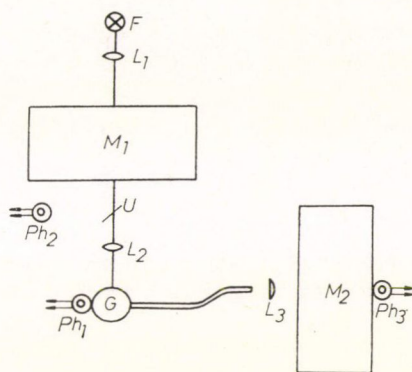
Erősen fluoreszkáló oldatok esetében a kilépő résen távozó spektrálisan bontatlan lumineszcencia és gerjesztő fény intenzitása közel azonos is lehet, aminek következtében a (3) formulával számított $k(\lambda)$ értékek hibásak lesznek. Ilyen esetekben a Ph_1 fotoelektron-sokszorozó elé egy olyan szűrőt vagy monokromátort kell beiktatni, amely a fluoreszcencia fényt nem engedi át. Az 1. ábrán az Sz száloptikai köteg az L_3 hengerlencse és M_2 monokromátorból álló rendszer szolgál a fenti célra, a fluoreszcencia színekép és az $\eta(\lambda)$ hatásfok-függvény is ezeknek segítségével mérhető meg.

Az abszorpciós színekép felvétele a következő módon történik: G -t oldószerrel megtöltve M_1 hullámhossz dobját az abszorpciós színekép tartományának megfelelő hullámhosszokra állítjuk, s mérjük a Ph_1 -en létrejött $I_0(\lambda)$ fotoáramokat, majd G -be az oldatot töltve, ismét beállítjuk M_1 -en az előbbi hullámhosszakokat, miközben az $I(\lambda)$ fotoáramokat mérjük. Amennyiben Ph_1 helyett az Sz , L_3 , M_2 rendszert kell használni, akkor az M_1 és M_2 monokromátorokon ugyanazt a hullámhosszat kell beállítani, az $I_0(\lambda)$ és $I(\lambda)$ fotoáramokat pedig a Ph_3 segítségével kell meghatározni.

A fluoreszcencia színekép felvételére az 1. ábrán vázolt berendezést a következő módon használhatjuk fel. Az M_1 monokromátorral kiválasztjuk az F fényforrás fényéből a közel monokromatikus gerjesztő fénynyalábot, amely G -be jutva abszorbeálódik a lumineszcencia sugárzásra képes közegben. G kilépő nyílásán távozó fluoreszcencia fényt spektrálisan az M_2 monokromátor bontja fel. A közel monokromatikus fluoreszcencia fény által a Ph_3 fotoelektron-sokszorozón kiváltott $I_f(\lambda)$ fotoáramokat mérjük. A [4]-ben leírt módon meghatározzuk az Sz , L_3 , M_2 , Ph_3 rendszer $Q(\lambda)$ spektrális érzékenységét, s az $I_f(\lambda)Q(\lambda) = f^*(\lambda)$ külső fluoreszcencia színeképből a (7) formula alapján határozzuk meg a belső fluoreszcencia színeképet.

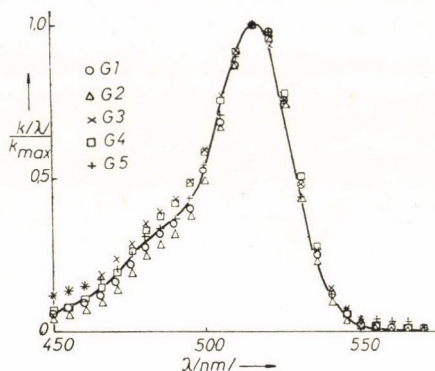
Az $\eta(\lambda)$ hatásfokfüggvény meghatározására is alkalmas az 1. ábrán vázolt készülék. Ezenél a vizsgálatoknál a Ph_2 fotoelektron-sokszorozót a gerjesztő energia mérésére hitelesíteni kell [3].

3. A fenti módszerrel végzett mérések eredményeiből alább mutatunk be néhányat. Azt kaptuk, hogy az edény alakja, falának vastagsága, ill. a fal megmunkálása nincs jelentős befolyással a mért eredményekre. A fény által az edényben megtett út



1. ábra

hossza elsősorban az edény térfogatától függ. A mérések annál biztosabban végezhetők el, minél nagyobb a vizsgált színek tartományban az edény falának, és a külső tükröző, ill. fényszóró felületnek együttes $R(\lambda)$ reflexiós koefficiense. Amennyiben $R(\lambda)$ változik a hullámhosszal (pl. ezüst bevonat esetén ultraibolya tartományban)



2. ábra

1. TÁBLÁZAT

Nr	Vizsgált anyag és koncentrációja (mol/l)	Oldószer
3a	Kristályibolya $1 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O
3b	Brillant zöld $1 \cdot 10^{-4}$; $1 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O
3c	Fuchsin $1 \cdot 10^{-4}$; $1 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O
3d	Auramin $1 \cdot 10^{-4}$; $2 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O
3e	K Mn O ₄ $1 \cdot 10^{-3}$; $4 \cdot 10^{-6}$	H ₂ O
3f	Káliumbikromát $1 \cdot 10^{-3}$; $1 \cdot 10^{-6}$	H ₂ O

nokromátoros változatban történtek. A kicsiny és nagy koncentrációjú oldatok görbéi között mutatkozó eltérések a koncentráció-különbségből származó fizikai-kémiai effektusok következményei lehetnek, kivéve a 3f ábrát, ahol A hullámhossz függése játszik szerepet.

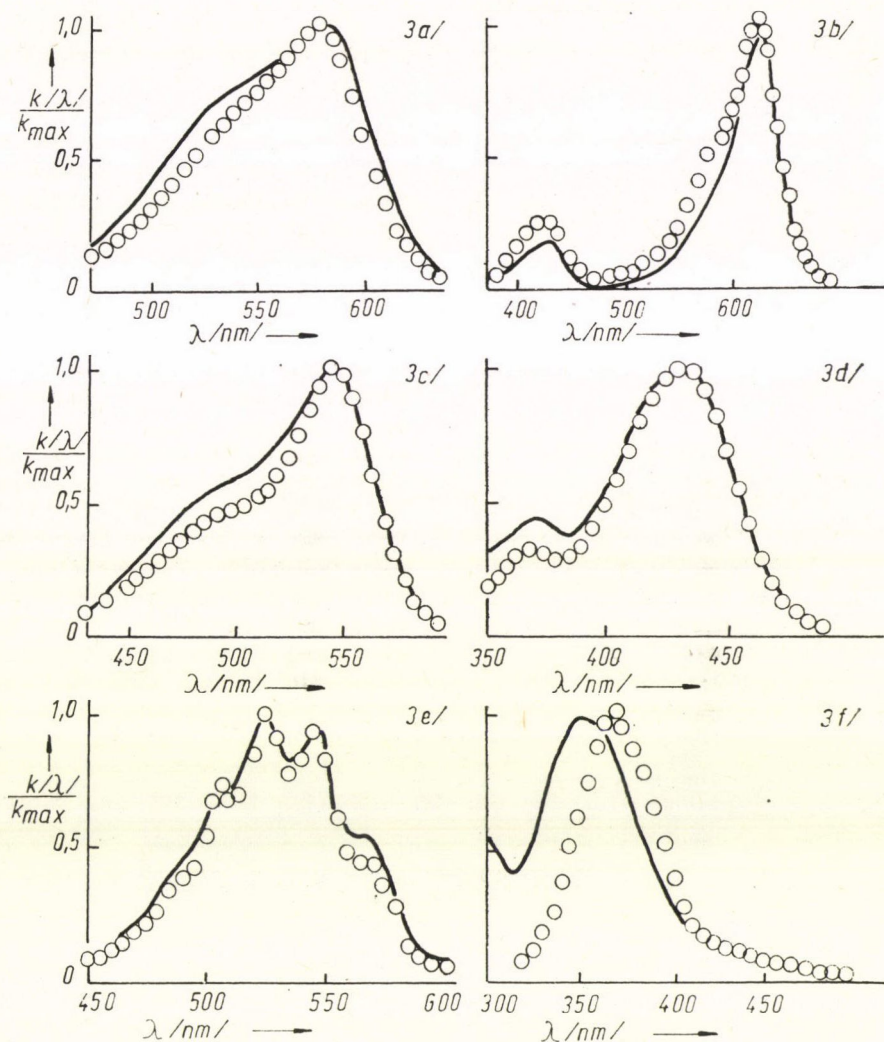
A 4. ábrán fluoreszkáló festékek abszorpciós színeképeit tüntettük fel. A mérések a kísérleti berendezés kétmonokromátoros elrendezésével történtek. Az oldatokra vonatkozó adatokat a 2. táblázat tartalmazza. A fluoreszcencia fény zavaró hatásának, illusztrálása céljából a 4 b) ábrán fekete körökkel feltüntettük az egymonokromátoros elrendezéssel mért színeképeket is, amely a rövid hullámhosszú részen lényege-

a mérések elvégzése nehézségekbe ütközik, mert a (3)-ban szereplő A függ a hullámhossztól.

A második ábrán négy különböző küvetával mért abszorpciós színeképeket adunk meg különböző jelekkel, amelyek vízben oldott, $5 \cdot 10^{-8}$ mol/l koncentrációjú eozinra vonatkoznak. Az ábrán folytonos vonallal rajzolt görbe ugyanezen oldatnak $1 \cdot 10^{-4}$ mol/l koncentrációnál egy Optica Milano gyártmányú CF 4 típusú spektrofotométeren hagyományos módszerrel mért abszorpciós színeképe. Az ábrán adott egyes színek meghatározása a következő küvetákkal történt: G1 jeni molibdén uviol-üvegből készült MgO-al bevont, $r=3,9$ cm sugarú gömb, G2 közönséges üvegből készült ezüstbevonatú $r=4,3$ cm sugarú gömb, G5 kvarcüveg gömb magnéziumoxid bevonattal $r=4,9$ cm. G5 $V=80$ cm³ térfogatú henger közönséges üvegből, ezüst bevonattal. Az ábra szerint azt mondhatjuk, hogy a különböző küvetákkal mért abszorpciós színeképek egymáshoz és a nagy koncentrációjú oldat színekéhez viszonyítva csaknem azonos menetűek.

A 3. ábrán hat olyan oldat abszorpciós színeképe látható, amelyek nem fluoreszkálnak. Az oldatokra és a mérés körülményeire vonatkozó adatokat az 1. táblázat tartalmazza. A mérések az 1. ábrán vázolt berendezéssel egy mo-

sen megemelkedik. A nagy és kicsiny koncentrációjú oldatok színeképek alakjában mutatkozó különbségek a koncentráció változás következményeinek tekinthetők ezen oldatoknál is.



3. ábra

Az 1. ábrán megadott abszorpciós színeképekhez tartozó emissziós színeképeket az 5. ábrán mutatjuk be. Az emissziós színeképek egymáshoz viszonyított menetéről ugyanazt mondhatjuk el, mint az abszorpciós színeképek esetében. További fluoreszcencia mérésekre vonatkozó eredmények láthatók a 6. ábrán. Az oldatokra és a gerjesztés körülményeire vonatkozó adatokat a 3. táblázat tartalmazza.

2. TÁBLÁZAT

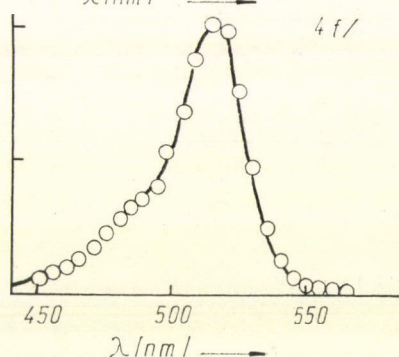
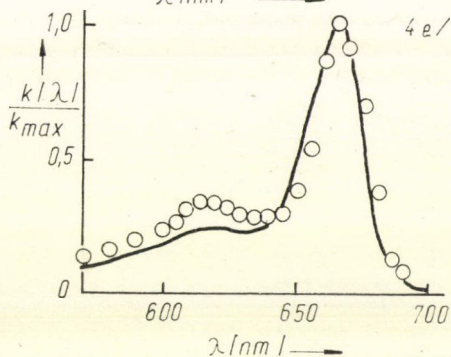
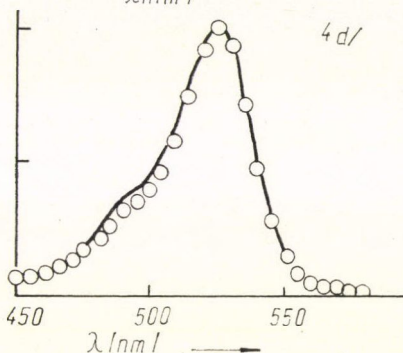
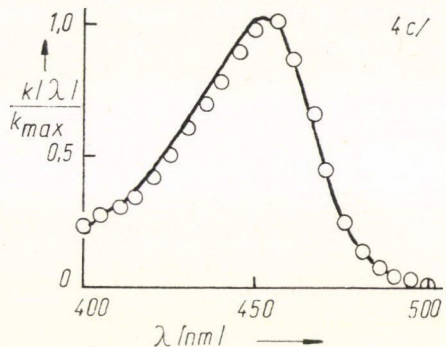
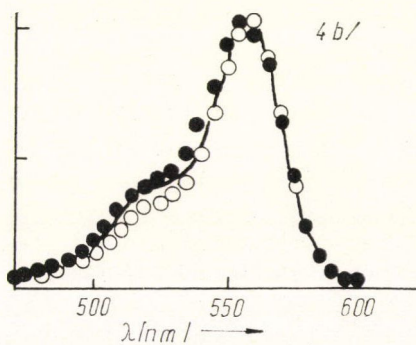
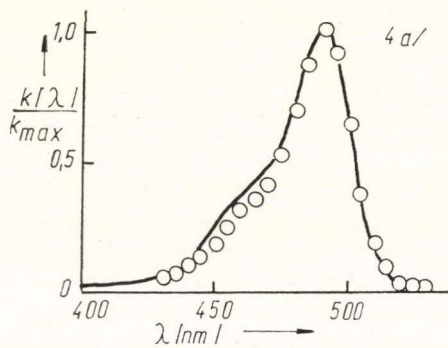
N ₂	Fluoreszkáló anyag és koncentrációja (mol/l)	Oldószer
4a	Fluoreszcein $1 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O $1 \cdot 10^{-2}$ mol/l NaOH
4b	Rodamin B $1 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O 6% CH ₃ COOH
4c	Tripaflavin $5 \cdot 10^{-5}$; $1 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O 6% CH ₃ COOH
4d	Rodamin 6G $1 \cdot 10^{-5}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O
4e	Chlorophyll a $1 \cdot 10^{-4}$; $1 \cdot 10^{-7}$	CH ₃ OH
4f	Eozin $5 \cdot 10^{-5}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O $1 \cdot 10^{-2}$ mol/l NaOH

3. TÁBLÁZAT

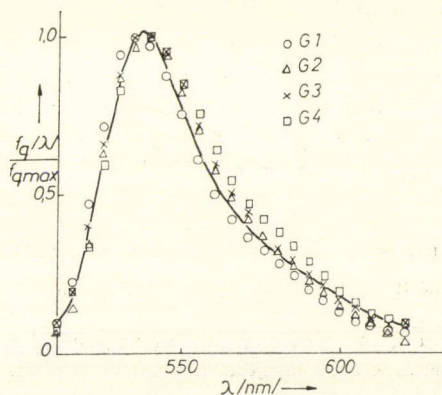
N ₂	Fluoreszkáló anyag és koncentrációja (mol/l)	Oldószer	Gerjesztő fény hullámhossza (nm)
6a	Fluoreszcein $1 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O $1 \cdot 10^{-2}$ mol/l NaOH	436
6b	Eozin $5 \cdot 10^{-5}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O $1 \cdot 10^{-2}$ mol/l NaOH	480
6c	Rodamin B $1 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O 6% CH ₃ COOH	510
6d	Tripaflavin $5 \cdot 10^{-5}$; $1 \cdot 10^{-7}$	H ₂ O 6% CH ₃ COOH	436
6e	Chlorophyll a $1 \cdot 10^{-4}$; $1 \cdot 10^{-7}$	CH ₃ OH	415, 435 620, 650
6f	Rodamin 6G $1 \cdot 10^{-5}$; $5 \cdot 10^{-8}$	H ₂ O	480

A fentebb bemutatott mérési eredmények megerősítik az ismertetett eljárás kidolgozása során tett feltevéseinket. Az igen kicsiny fényabszorpcióval rendelkező közegek abszorpciós és emissziós színeképei nagy pontossággal meghatározhatók az új eljárással.

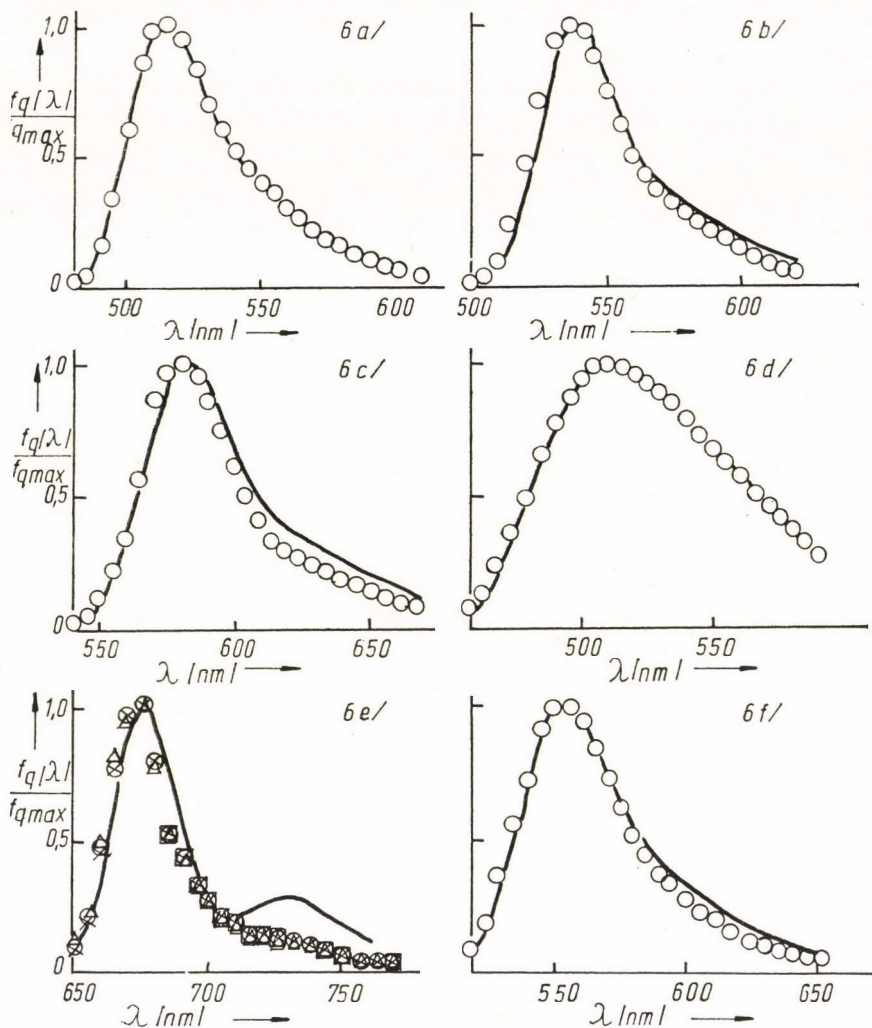
Mint már fentebb említettük, a gömbküvetta alkalmazása előnyös fényszóró közegek spektrofotometriai tanulmányozásánál. Ilyen rendszert képeznek az élő baktérium- vagy gombasejteket tartalmazó szuszpenziók. Az általunk alkalmazott mérőmódszer lehetővé teszi a sejtben levő pigmentek abszorpciós színeképekévé, közvetlen, a sejtből való kivonás nélküli meghatározását. A 7. ábrán tíz rendszeren végzett abszorpció mérés eredményét tüntettük fel. A vizsgált folyadékokra vonat-



4. ábra



kozó adatok a 4. táblázatban találhatók.¹ Hét esetben a gömbküvetékkal mért színeképek mellett folytonos vonallal felrajzoltuk ugyanezen szuszpenziókra nagyobb koncentrációnál egy Optica Milano CF—4DR típusú kétsugaras rácso

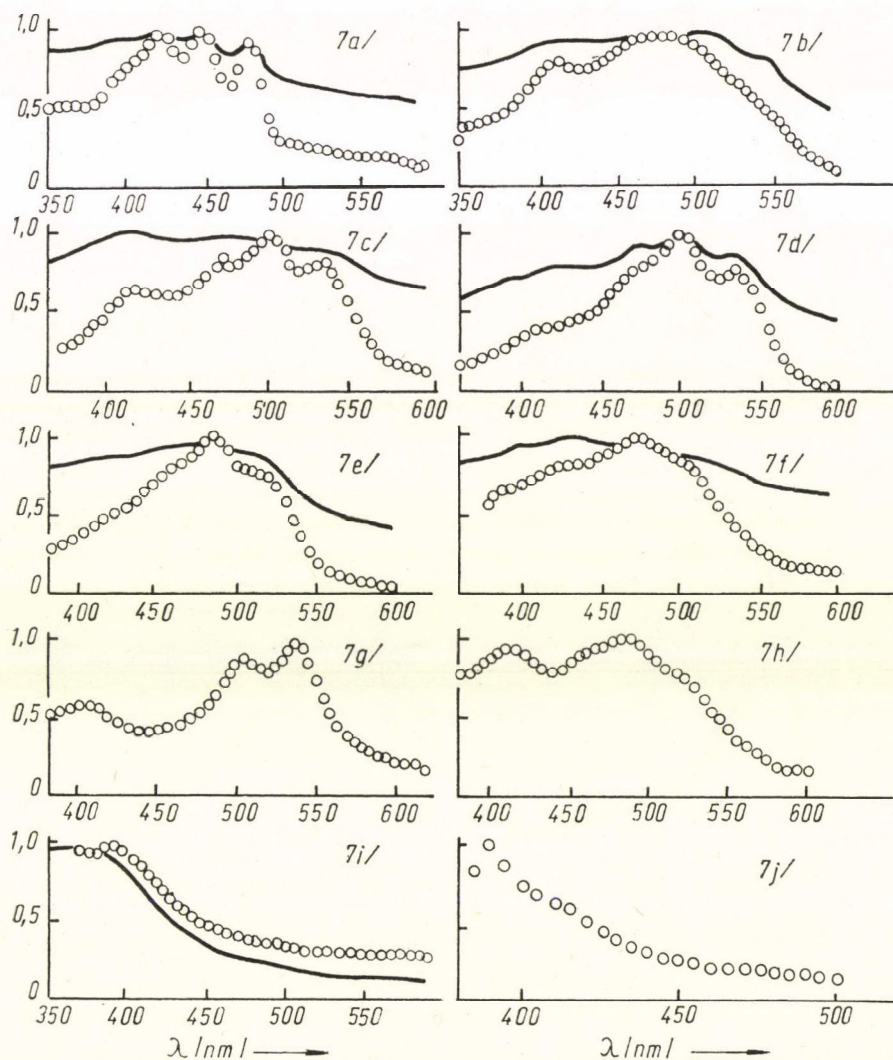


6. ábra

spektrofotométeren a készülék Ulbricht gömbjének segítségével mért görbékét is. Ezek a színeképek a fényszórás miatt nagyon szélesek, struktúráltságuk elmosódott.

¹ A szerzők köszönetüket fejezik ki dr. Kevei Ferencnek, a sejtszuszenziók előállításáért és a mérések során nyújtott hasznos tanácsaiért.

A gömbküvetttával mért színekpek meredek lefutásúak, s az egyes abszorpciós sávok jól elkülönülnek egymástól. A két módszerrel mért adatok közötti különbség abból ered, hogy a spektrofotométer integráló gömbje csupán az alkalmazott hasábküvetta egyik oldalán kilépő szórt fénysugarak egy részét gyűjti össze, s így a többi szórt fényből származó veszteség látszólagos abszorpció növekedésben mutatkozik meg. Mivel a gömbküvetttánál ezek a veszteségek nem lépnek fel, a jelekkel felrajzolt görbék az élő sejt valódi abszorpciós színekpekének tekinthetők.



7. ábra

Jelen dolgozatban néhány példát kívántunk bemutatni egy új mérési eljárásra vonatkozóan. Olyan feladatok, amelyeknél előnyös a gömbküvetta alkalmazása, nagy számmal sorolhatók fel a biológia, az orvostudomány, a kémia, a fizika különböző területéről. Néhány idevonatkozó vizsgálatunk eredményéről más helyen számolunk be.

4. TÁBLÁZAT

№	Vizsgált anyag és koncentrációja (sejt/ml)	Oldószer
7a	<i>Sarcina lutea</i> $8,25 \cdot 10^8$; $1,98 \cdot 10^7$	fiziológiás sóoldat
7b	<i>Rhodotorula minuta</i> $5,25 \cdot 10^8$; $3,15 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7c	<i>Rhodotorula mucilaginosa</i> $6,5 \cdot 10^8$; $6,5 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7d	<i>Rhodotorula rubra</i> $3,25 \cdot 10^8$; $1,3 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7e	<i>Hungarica Diószegia</i> $7,75 \cdot 10^8$; $2,75 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7f	<i>Mycobacterium freiburgi</i> $1,5 \cdot 10^8$; $2,7 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7g	<i>Serratia marcescens</i> $1 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7h	<i>Bacillus prodigiosus</i> $1 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat
7i	<i>Nigrococcus Nigricans</i> $1,7 \cdot 10^8$; $1,36 \cdot 10^7$	fiziológiás sóoldat
7j	<i>Bacillus pyocyaneus</i> $1 \cdot 10^6$	fiziológiás sóoldat

A szerzők halálával tartoznak *Budó Ágoston* akadémikusnak, az intézet elhunyt igazgatójának, aki a vizsgálatokat érdeklődéssel kísérte és támogatta.

IRODALOM

- [1] *A. A. Шишловски*, Прикладная физическая оптика, Физматгиз., Москва 1961; *В. Л. Левшин*, Методы Спектрального анализа, Изд. Московского Университета, Москва 1962.
- [2] *I. Ketskémety, L. Kozma*, Acta Phys. Hung., megjelenés alatt.
- [3] *I. Ketskémety, J. Dombi, J. Hevesi, R. Horvai, L. Kozma*, Acta Phys. et Chem. Szeged, 7, 88, 1961.
- [4] *I. Ketskémety, J. Dombi, R. Horvai, J. Hevesi, L. Kozma*, Acta Phys. et Chem. Szeged, 7, 17, 1961.

TAPASZTALATOK Ge(Li) γ -SPEKTRUMOK SIMÍTÁSÁVAL KAPCSOLATBAN*

RAICS PÉTER ÉS DARÓCZY SÁNDOR

KLTE, Kísérleti Fizikai Tanszék, Debrecen

A spektrum-simítás (smoothing) spektrumok kiértékeléséhez előkészítő matematikai eljárás. Alkalmazása különösen rossz statisztikájú méréseknél hasznos. A cikk a megfelelő módszer kiválasztásának és ellenőrzésének lehetőségeit tárgyalja konkrét spektrumok bemutatásával.

I. Bevezetés

A Ge(Li) detektorok nagy felbontóképessége lehetővé teszi olyan összetett γ -spektrumok analízisét is, mint amilyenekkel pl. az (n, γ) -reakciók vagy a maghasadás tanulmányozásánál találkozunk. Ezekre nemcsak a sok csúcs jellemző, hanem az is, hogy itt az energia csökkenésével különösen zavaró a nagyobb energiájú csúcsok Compton-tartományától eredő háttér. Emiatt önmagában véve még elfogadható statisztikájú csúcsok a kis és közepes energiáknál „elmerülhetnek” a háttér nagy statisztikus ingadozásaiban. Komplex spektrumoknál a háttér ingadozásaiból jól kiemelkedő, de egymáshoz közel eső, esetleg egymásba olvadó csúcsok helyének (energiájának) és területének (intenzitásának) kiértékelésekor a háttér pontos menetének meghatározása is sokkal nehezebb, mint a néhány vonalból álló egyszerű spektrumoknál.

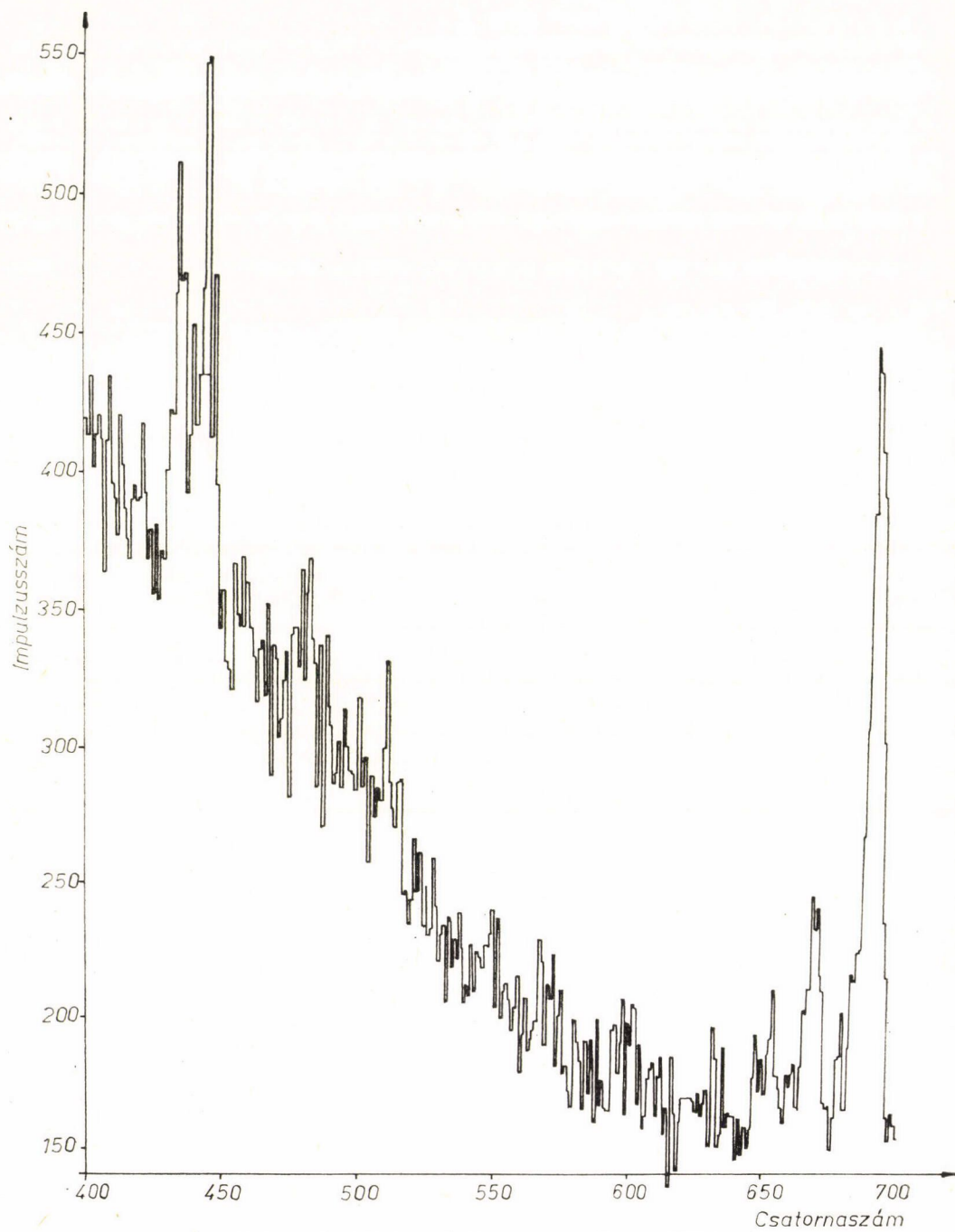
Az 1. ábra U^{238} 14 MeV-os neutronok hatására keletkező hasadási termékeinek γ -spektrumából mutat egy részletet. Ebben a tartományban a detektor és a mérőrendszer együttes félértékszélessége ~ 6 csatorna (~ 6 keV). A 435., 445., 668. és 690. csatorna környékén egyértelműen azonosítható csúcsok látszanak, bár a rossz statisztika miatt területük és helyük pontos meghatározása nehéz. Nagyobb problémát jelentenek a 457., 480., 509., 599. és a 652. csatorna környékén levő 5–10 csatornás csoportosulások, amelyek nem tekinthetők a háttér véletlen ingadozásainak. Az 1–2 csatornás ingadozásokról természetesen nem mondható el ugyanez, ha a spektrométer félértékszélességét komolyan vesszük.

A megfelelően alkalmazott görbesimítás olyan matematikai eljárás, amivel „láthatóvá” lehet tenni a háttér statisztikus ingadozásaival összemérhető intenzitású csúcsokat és a háttérnek a valóságoshoz közelebb álló menetét.

A simítási eljárásnak ki kell elégítenie az alábbi követelményeket:

- a) csúcsokat ne tüntessen el és ne hozzon létre,
- b) a csúcs helyét és területét ne változtassa meg,

* Érkezett 1971. január 15.



1. ábra. Hasadási termékek mért γ -spektruma ($U^{238} + n_{14}$)

- c) a nagy intenzitású csúcsok alakját, amplitúdóját és félértékszélességét csak minimálisan befolyásolja,
- d) a hasznos részleteket tartsa meg.

Vezessük be a simítás hatékonysága és jósága fogalmát. Két simítás közül hatékonyabbnak nevezzük azt, amely az eredeti spektrum statisztikus fluktuációit erősebben megszüri, jobbnak pedig azt, amely az $a)$, $b)$, $c)$ és $d)$ pontban megfogalmazott követelményeket jobban kielégíti. A későbbiekben megpróbáljuk a hatékonyság és jószág mértékét kvantitatíve is megfogalmazni.

II. A simítás matematikai és fizikai alapjai

A simítással a mért spektrum minden egyes csatornatartalmát új értékkel helyettesítjük, amely csak a kiszemelt és a közvetlen szomszédos csatornák tartalmától függ. Ez a különbség egy diszkrét változójú függvény simítása és pl. azon eljárás között, amikor a legkisebb négyzetek módszerével a függvény értékeire valamilyen görbét illesztünk. A szokásos simítási módszerek egyenletesen változó abszcissza (esetünkben a csatornaszám) esetén alkalmazhatók.

Több simítási eljárás ismert, s ezek matematikai alapjai már régen kidolgozottak [1, 2, 3, 4]. Ezek közül mindig a konkrét feladat természetétől függően kell a megfelelőt kiválasztani. A mi követelményeinknek legjobban a legkisebb négyzetek módszerével illesztett polinomos simítás (least squares polynomial smoothing) felel meg. A továbbiakban csak ezzel foglalkozunk.

A polinomos simítást a statisztikában [4], a kémiában [5, 6], az atomi és mag-spektroszkópiában széles körben használják. Ez utóbbinál elsősorban a szcintillációs γ -spektrometriában alkalmazták [7, 8, 9]. A félvezetődetektorok és többzezer csatornás analizátorok használata azonban fokozottabban megköveteli a simítást a spektrumok kiértékeléséhez. Ezért a következőkben a simítás matematikai és fizikai alapjaival foglalkozunk, példákat mutatunk be az alkalmazásokra és megpróbálunk kritériumokat adni a legmegfelelőbb eljárás kiválasztására.

II. 1. Matematikai leírás

A spektrum minden i -edik csatornatartalmára a tőle balra és jobbra levő m számú, közvetlen szomszédos, egymás utáni pont felhasználásával n -edfokú polinomot illesztünk a legkisebb négyzetek módszerével. Az így kapott értéket nevezzük az i -edik csatorna $(2m+1)$ -pontos simított tartalmának. Kell, hogy $2m+1 > n$ legyen. (Az első és utolsó m csatorna tartalmát nem lehet így simítani, ez azonban általában nem okoz gondot a sokcsatornás spektrumoknál. Ha mégis, akkor használhatjuk az [5]-ben található, korlátozott pontosságú eljárásokat ezekre a pontokra.)

A görbeillesztés szempontjából legyen koordináta-rendszerünk 0-pontja az i -edik csatorna, j az a futóindex, amellyel a simításhoz szükséges szomszédos csatornákat jelöljük, $j = -m, \dots, 0, \dots, m$. Ekkor a polinom alakja:

$$f_{i+j} = \sum_{k=0}^n a_{nk} \cdot j^k. \quad (1)$$

Legyen az i -edik csatorna tartalma y_i . A legkisebb négyzetek elve szerint:

$$\frac{\partial}{\partial a_{nk}} \sum_{j=-m}^m (f_{i+j} - y_{i+j})^2 = 0. \quad (2)$$

Valamely tetszőleges a_{nl} együtthatóra ($l=0, 1, 2, \dots, n$) elvégezve a deriválást, kapjuk:

$$\sum_{j=-m}^m \sum_{k=0}^n a_{nk} \cdot j^{k+l} = \sum_{j=-m}^m y_{i+j} \cdot j^l. \quad (3)$$

A polinom együtthatóit ennek a lineáris egyenletrendszernek a megoldásai adják.

Az (1) polinomnak a (2) feltétel mellett egyetlen értéket, az y_i csatornatartalmat kell a legjobban közelítenie, azaz $j=0$, amiből:

$$f_i = a_{n0} = S_i, \quad (4)$$

ahol S_i a simított értéket jelöli. A (3) egyenletrendszert tehát csak az a_{n0} -ra kell megoldani. Ez a megoldás függ az $y_{i-m}, \dots, y_i, \dots, y_{i+m}$ értékektől és a simított érték lényegében ezek súlyozott átlaga.

Belátható, hogy bármely páros és az azt követő páratlan fokszámú polinom esetén a (3) egyenletrendszerből a_{n0} meghatározásához mindig kiválaszthatók olyan egyenletek, amelyek mindkét polinomnál azonosak. Ezért két ilyen polinomra a simított csatornatartalom ugyanaz.

II. 2. A polinom fokszámának megválasztása

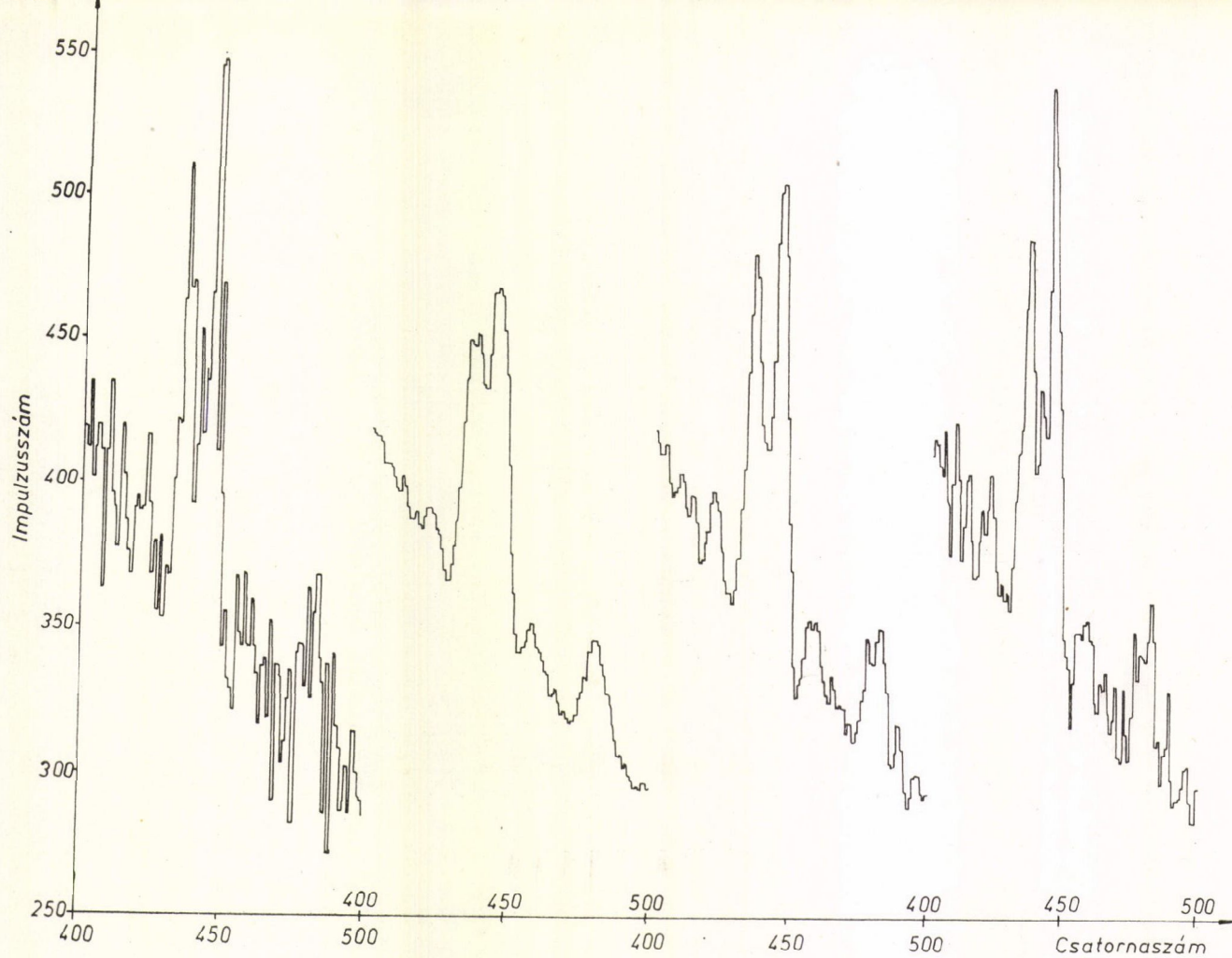
Adott m -nél annál jobban illeszkedik a polinom nagy görbületekre is, minél nagyobb az n . A túl magas fokszám arra vezethet, hogy a simítás nem szűri ki a véletlen ingadozásokat, a túl alacsony pedig hasznos információkat tüntethet el. A γ -spektrum legnagyobb görbülete a csúcsokban van. Ezért általánosan mondhatjuk: adott m -nél a simító polinom fokszáma olyan legyen, hogy görbülete nagyjából a csúcs görbületével egyezzen meg.

$n=0, 1$ esetén a simító polinom konstans, illetve egyenes. Ekkor a (3) egyenletrendszer megoldása tetszőleges m -re az egyes csatornatartalmak egyszerű átlagát adja simított értéként. Ezt mozgó átlagnak (moving average, moving line) is nevezik. $n=2, 3$ -nál a polinom másod-, ill. harmadfokú parabola. A (3) egyenletrendszerből kiszámított simítási együtthatókat és normálási tényezőket néhány m -re a Függelékben összefoglaltuk. Az $n>3$ fokszámú simítások együtthatói az [1, 6] irodalomban találhatók.

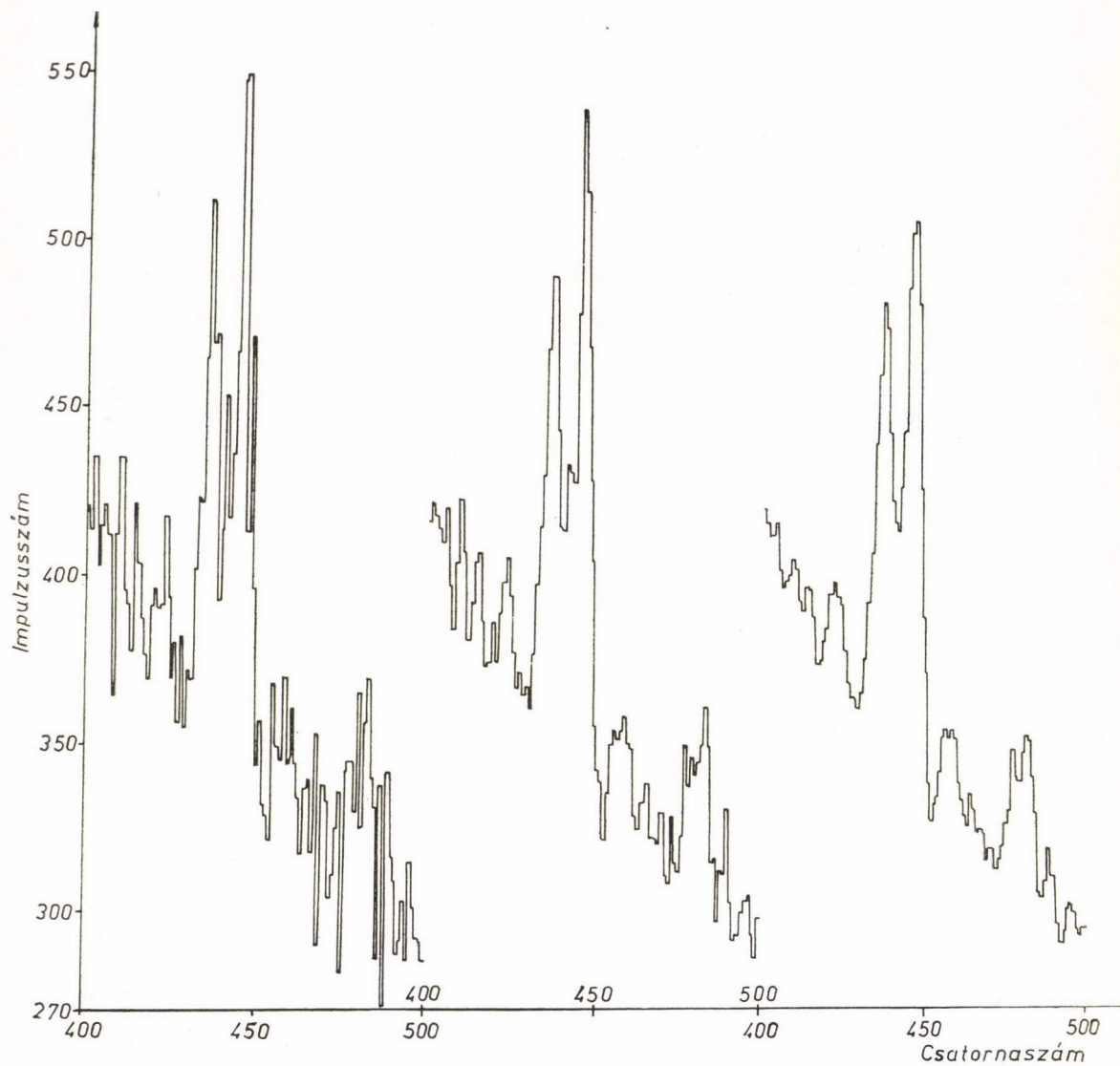
A polinom fokszámának hatása a simításra a 2. ábrán látható, ahol az 1. ábra első 100 csatornáját 7-pontos mozgó átlaggal, másod- és negyedfokú polinommal simítottuk. Látható, hogy a negyedfokú polinom nem szűr eléggé, míg a mozgó átlag torzít. Általánosan is mondhatjuk, hogy a Ge(Li) γ -spektrometriában a legcélszerűbbnek a másod-harmadfokú polinomos simítás látszik. A következőkben ezt fogjuk vizsgálni.

II. 3. Az m megválasztása

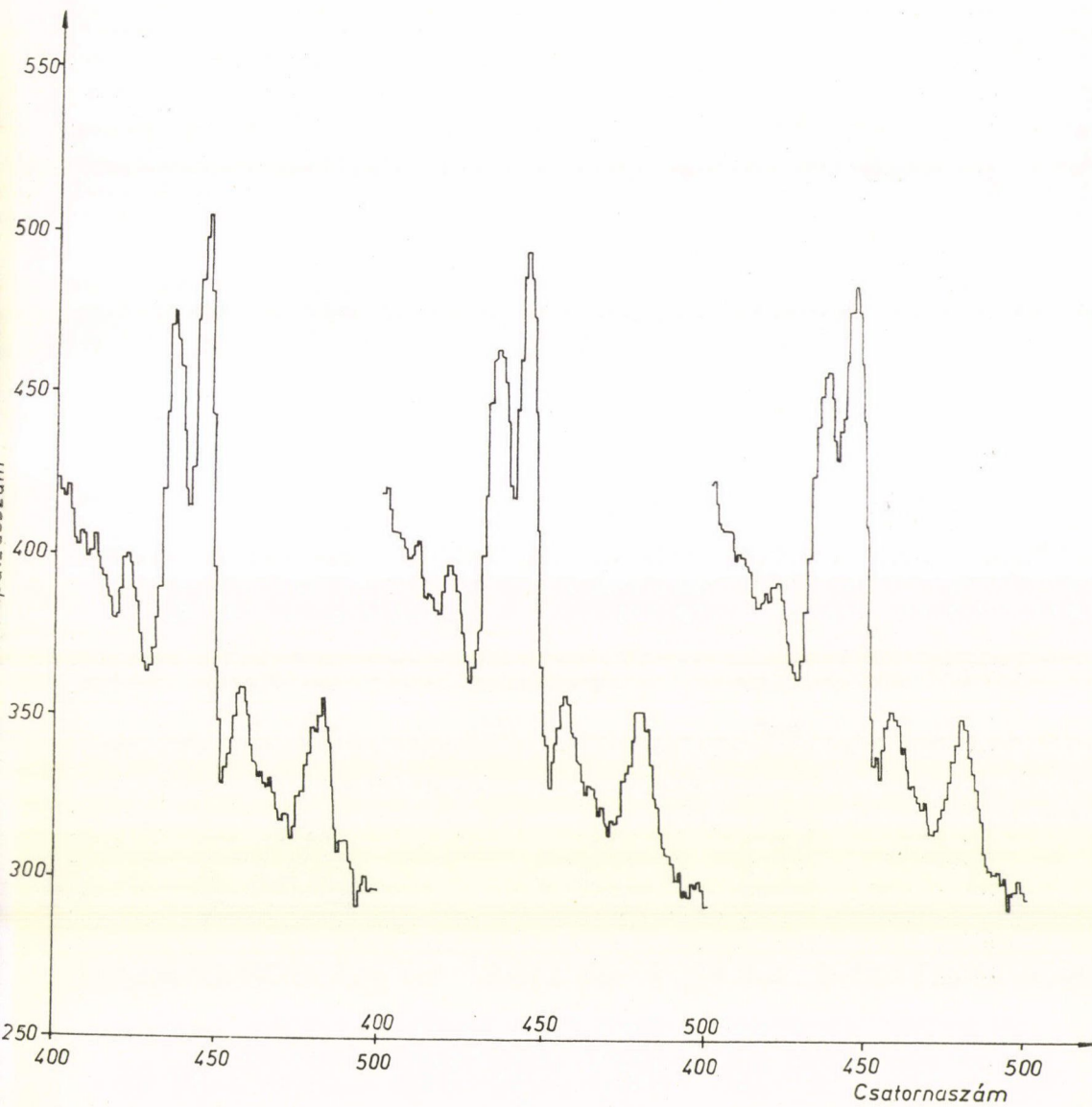
A simítás fizikai alapja az, hogy a spektrométerek tulajdonságai miatt a csúcsot alkotó csatornatartalmak nem tekinthetők egymástól függetleneknek. (A korreláltság egyébként nemcsak a csúcsoknál, hanem az egész spektrumban fennáll.) A Ge(Li)



2. ábra. A polinom fokszámának (n) hatása a simításra: mért spektrum, 7-pontos mozgó átlag, 7-pontos másod-harmadfokú és 7-pontos negyed-ötödfokú polinom (balról jobbra haladva)



3a. ábra. A simítás pontszámának (m) hatása: mért spektrum, 5- és 7-pontos simítás



3b. ábra. A simítás pontszámának (m) hatása: 9-, 11- és 13-pontos simítás

detektorok adta csúcs-alak — mint erről standard spektrumok segítségével meggyőződhetünk — a csúcsponthoz közeli tartományokban jó közelítéssel Gauss-eloszlásúnak tekinthető [10]. A Gauss-függvénynek $\pm\sigma$ helyen (σ az eloszlás diszperziója) inflexió pontja van, míg a másodfokú parabolának ilyen nincsen. Tekintve, hogy a csúcs félértékszélessége $\sim 2,355 \cdot \sigma$, a csúcs alakját nem torzítjuk el túlságosan, ha az m megválasztására előírjuk:

$$2m + 1 \sim \text{félértékszélesség (csatornaszámban)} \quad (5)$$

kell, hogy legyen.

m hatását a simításra a 3a) és 3b) ábrán látjuk, ahol az 1. ábra első 100 csatornatartalmának 5-, 7-, 9-, 11- és 13-pontos simítását tüntettük fel a megfelelő mért (simítatlan) spektrumrészlettel együtt. Nézzük először a spektrumok durvaszerkezetét: megnyugtató, hogy a simítás m -től függetlenül mindig a 422., 457. és 480. csatorna környékén „hozza” a kis csúcsoakat, éppen ott, ahol az eredeti spektrumban is fellépnek a már említett 5–10 csatornás csoportosulások. A spektrumok finomszerkezetében azonban már lényeges különbségek figyelhetők meg. Mivel ebben a tartományban a spektrométer félértékszélessége 6 csatorna, (5) szerint az 5- és 7-pontos simítástól várhatjuk a legrealisabb eredményt. A két, nagyobb intenzitású csúcs alakjának és félértékszélességének alapján az 5-, 11- és 13-pontos simítást nem tekinthetjük alkalmasnak. Ugyanilyen alapon nem dönthetünk azonban a 7- és 9-pontos simítás között, s nem lenne kielégítő az (5) mechanikus alkalmazása sem. Hasonló esetekben nélkülözhetetlen az eredeti és a simított spektrum vizuális összehasonlítása. A 3a) ábrán az eredeti spektrumban, a 480. csatorna környékén levő csoportosulás szemmel láthatóan szélesebb, mint a 422. és 457. csatornánál levő, ami arra enged következtetni, hogy a 480. csatornánál kettős csúcs várható. Ilyen alapon összehasonlítva a 7- és 9-pontos simítás eredményét, a 7-pontos mellett kell döntenünk, ami egyébként (5)-tel is összhangban van.

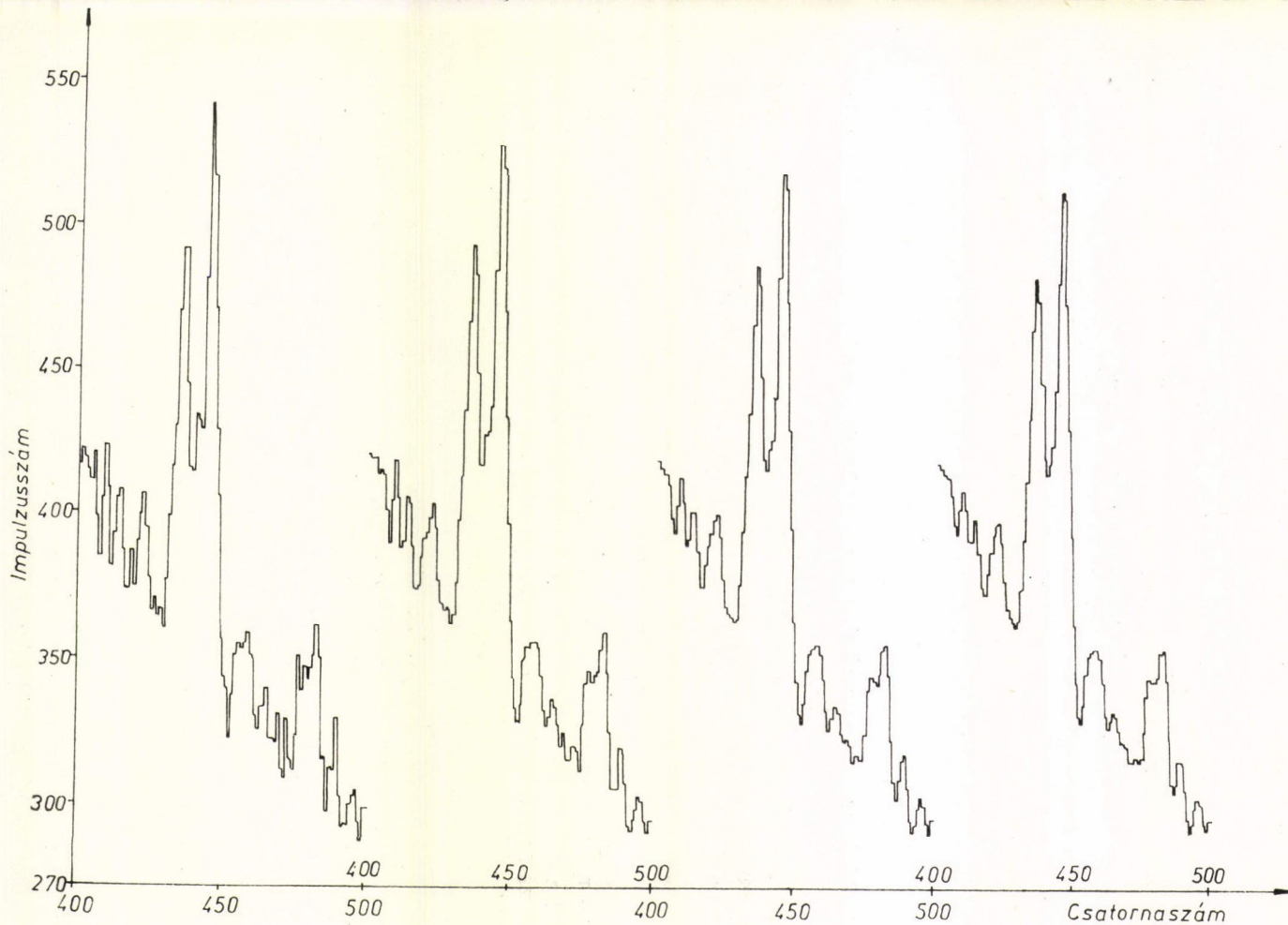
Hangsúlyoznunk kell, hogy m helyes megválasztására nagyon nehéz valamilyen abszolút objektív kritériumot előírni, ilyenrel az irodalomban sem találkozunk. Az (5) kritérium sem tekinthető matematikailag vagy fizikailag szigorúan megalapozottnak, hiszen érvényességét általános megfontolásokból és gyakorlati tapasztalatokból vontuk le.

A félértékszélesség az energia függvényében változik. Ha ez jelentős, akkor ajánlatos a spektrumot részekre osztani, s ezekben megfelelően megválasztani az m -et.

II. 4. Ismételt simítás

A 3a) és 3b) ábrán látható, hogy m növekedésével gyorsan növekszik a simítás hatékonysága, ez azonban nem mindig jár együtt a jóság növekedésével: a 7-pontos simítás hatékonyabb is, jobb is, de pl. a 11-pontos csak hatékonyabb és nem jobb mint az 5-pontos simítás. Éppen ezért a Ge(Li) γ -spektrumok esetén hasznos lehet az ismételt simítás, amely a hatékonyság növelése mellett javítja, de legalábbis nem rontja a jóságot. Ennek illusztrálására szolgál a 4. ábra, ahol az 1. ábra első 100 csatornatartalmának 5-pontos, egyszer-, kétszer- és háromszor ismételt 5-pontos simítását látjuk.

Az ismételt simítás keresztülvihető úgy, hogy a már simított spektrumot ismét simítjuk és így tovább. El lehet azonban végezni bármely ismételt simítást egy lépésben is, de ehhez új együttthatók szükségesek.



4. ábra. Ismételt simítások: 5-pontos egyszerű, egyszer, kétszer és háromszor ismételt 5-pontos simítás

A simított csatornatartalom általános alakja $(2m+1)$ -pontos simításra:

$$S_i^{(m)} = \frac{1}{N_m} \sum_{j=-m}^m C_j^{(m)} \cdot y_{i+j}, \quad (6)$$

ahol $N_m = \sum_{j=-m}^m C_j^{(m)}$, $C_j^{(m)}$ pedig a (3) egyenletrendszer (4) feltétel melletti megoldásából adódó együttthatók. Erre alkalmazva egy tetszőleges $(2p+1)$ -pontos, $C_l^{(p)}$ együttthatókkal és N_p normálási tényezővel jellemzett simítást, kapjuk:

$$S_i^{(m,p)} = \frac{1}{N_p \cdot N_m} \sum_{k=-(m+p)}^{m+p} D_k \cdot y_{i+k}, \quad (7)$$

ahol

$$D_k = \sum_{\substack{l=-(m+p) \\ j+l=k}}^{m+p} C_l^{(p)} \cdot C_j^{(m)}. \quad (8)$$

Jól látható, hogy (7) nem ekvivalens egy $[2(m+p)+1]$ -pontos simítással, bár ugyanennyi pontot használ fel. Számunkra elsősorban a $p=m$ eset érdekes; ekkor az r -szer alkalmazott, $(r-1)$ -szer ismételt $(2m+1)$ -pontos simításban $2rm+1$ számú pont vesz részt.

A (8) szerinti D_k együttthatókat és a megfelelő normálási tényezőket néhány m -re és r -re kiszámítottuk; ezek a Függelékben találhatók.

III. A simítás ellenőrzésének kvantitatív lehetőségei

Az I. fejezet végén bevezetett simítási jellemzőket, a simítás hatékonyságát és jóságát a teljes spektrumra és az egyes csúcsokra előírt követelmények együttesen határozzák meg. Így e jellemzők alkalmasak annak kvantitatív ellenőrzésére is, hogy a simítás mennyire változtatja meg az eredeti spektrumot. Az alábbiakban erre próbálunk néhány lehetőséget bemutatni.

III. 1. A simítás hatékonysága

A hatékonyság kvantitatíve a statisztikus fluktuációk csökkenésével fejezhető ki. A hibaterjedési törvényt alkalmazva a (6) kifejezésre és feltételezve, hogy az eredeti csatornatartalmak hibája a $(2m+1)$ -pontos tartományban azonos, azaz $\Delta y_{i+j} \sim \Delta y_i = \sqrt{y_i}$, kapjuk:

$$\Delta S_i^{(m)} \sim \frac{1}{N_m} \left[\sum_{j=-m}^m (C_j^{(m)})^2 \right]^{1/2} \Delta y_i. \quad (9)$$

Ennek alapján definiáljuk a H hatékonyságot:

$$H = \frac{1}{N_m} \left[\sum_{j=-m}^m (C_j^{(m)})^2 \right]^{1/2}. \quad (10)$$

H tehát kizárólag a simítási eljárásra jellemző mennyiség. Nyilván $H \leq 1$, és a simítás annál hatékonyabb, minél kisebb a H .

Az 5. ábrán a hatékonyságnak a simításban résztvevő pontok és az ismétlések számától való függése látható. Az egyes ismétlések az általuk felhasznált pontok számának, $(2m+1)$ -nek megfelelő helyen vannak feltüntetve. Egy adott $(2m+1)$ -pontos simításhoz tartozó ismétléseket szaggatott, az azonos ismétlési számú simításokat folytonos vonal köti össze.

Látható, hogy H a simítás pontjainak növelésével eleinte rohamosan, később egyre kevésbé csökken. Hasonló a helyzet az ismétléseknél: adott $(2m+1)$ esetén $r=4$ -nél feljebb nem várható lényeges javulás. Érdekes összehasonlítani az ismételt simítások hatékonyságát az eggyel nagyobb m -mel jellemezhető egyszerű simításokéval: pl. az 5-pontost ($m=2$) háromszor ismételve kb. a 7-pontoséval ($m=3$), a 9-pontost egyszer ismételve kb. a 11-pontoséval egyezik meg a H . Mindezek a 3a), 3b) és 4. ábrán konkrét spektrumokon szemléletesen is igazolhatók.

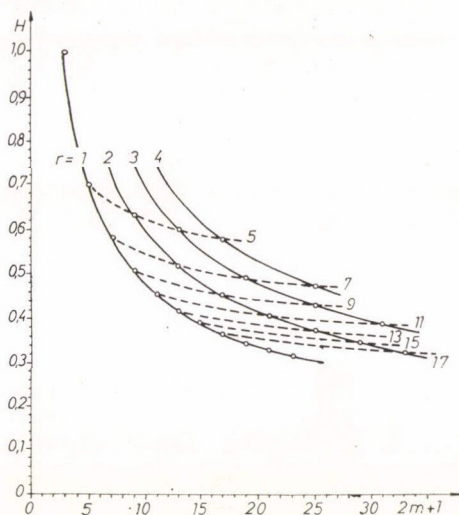
III. 2. A simítás jósága

A jóság általában az I. fejezet végén felsorolt négy pontban foglaltak kielégítését jelenti; kvantitatíve a csúcsok helyének, amplitúdójának, félértékszélességének és területének változásai alapján mérhető. Ez célszerűen jó statisztikájú standard spektrumok eredeti és simított csúcsainak összehasonlításával végezhető el.

Az I. táblázat a Co^{57} 122 keV-os, a Cs^{137} 662 keV-os és a Co^{60} 1333 keV-os csúcsa analízisének eredményeit tartalmazza. Ezeket súlyozott legkisebb négyzetek módszerével történt illesztésből [10] nyertük. (A feltüntetett hibák a módszerből a szokásos módon kapható standard deviációk.) A táblázatban a simítatlan, az egyszerű- és háromszor ismételt 5-pontos, valamint az egyszerű 7-pontos simítású csúcsokra vannak adatok.

A táblázatból látható, hogy nagy statisztikánál természetesen a legkisebb hatékonyságú simítás a legjobb. Olyan statisztikák esetére, ahol nagyobb hatékonyságú simításra van szükség, azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a félértékszélességgel egyenlő és akörüli pontszámú simítások akkor eredményeznek ugyanolyan jóságot, ha hatékonyságuk megegyezik. Ez a számításba jövő simítások közül a kisebb m -mel jellemezetteknl ismételt simítást jelent.

A fentiek szerint az 1. ábrán látható rossz statisztikájú spektrum simítására a háromszor ismételt 5-pontos és az egyszerű 7-pontos simítás egyaránt alkalmazható. Az előbbi hatását mutatja a 6. ábra.



5. ábra. A hatékonyság függése a simításban résztvevő pontok (m) és az ismétlések (r) számától (szaggatott vonal: azonos alappontszámú simítások, folytonos vonal: azonos ismétlési számú simítások)

I. TÁBLÁZAT

A simítás hatása a csúcs jellemzőire

Simítás \ Csúcs	Simítatlan (eredeti) $H = 1$	5-pontos egyszerű $r = 1$ $H = 0,697$	5-pontos háromszor ismételt $r = 4$ $H = 0,574$	7-pontos egyszerű $r = 1$ $H = 0,577$
-----------------	------------------------------------	--	--	--

 $\text{Co}^{57} - 122 \text{ keV}$

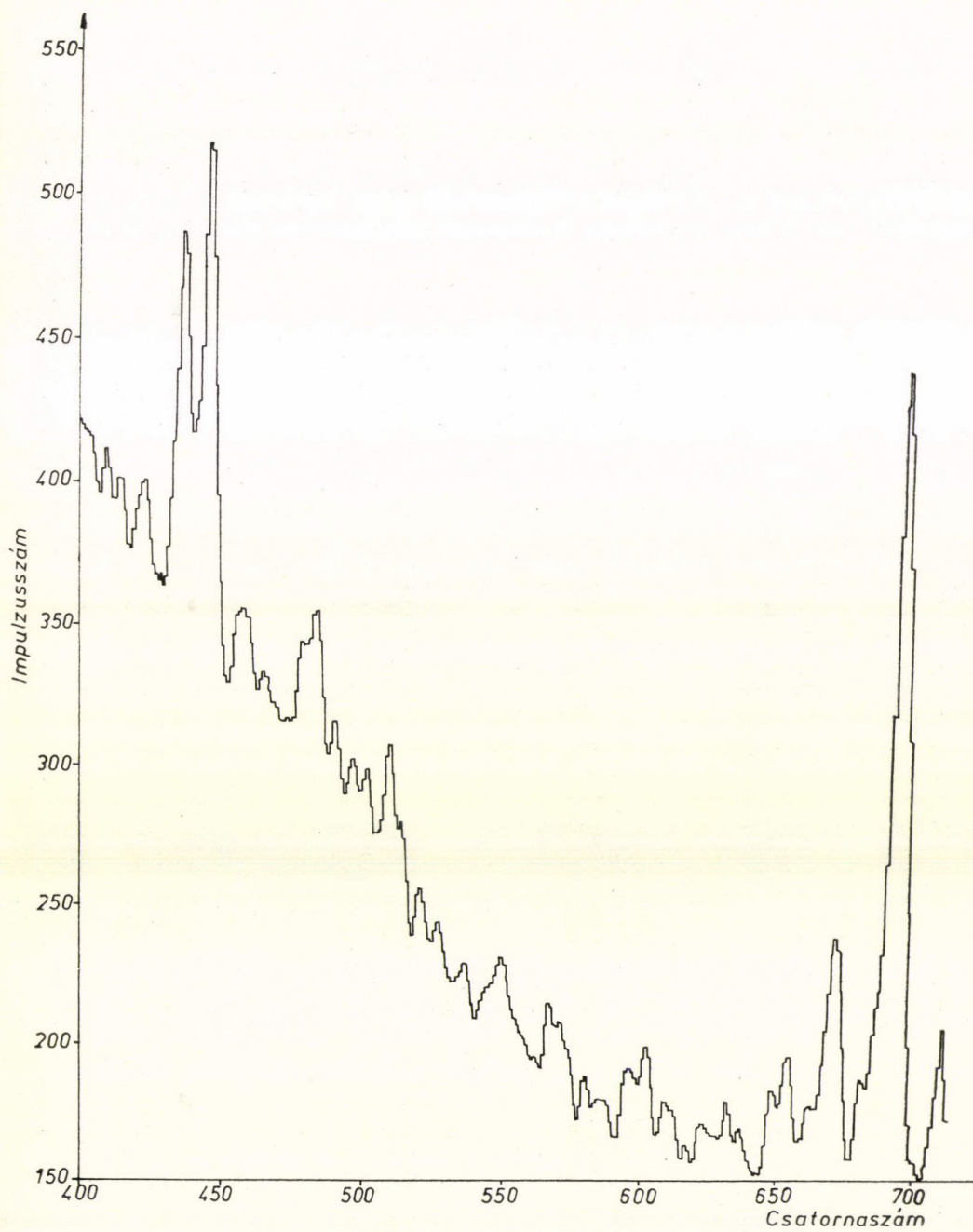
hely	(csatorna)	$115,80 \pm 0,063$	$115,81 \pm 0,074$	$115,77 \pm 0,14$	$115,79 \pm 0,074$
amplitúdó	(impulzus)	57170 ± 230	56521 ± 210	54862 ± 521	55169 ± 253
félérték	(csatorna)	$5,106 \pm 0,034$	$5,172 \pm 0,035$	$5,460 \pm 0,069$	$5,365 \pm 0,035$
terület	(impulzus)	330556 ± 1326	330667 ± 1227	329619 ± 3131	330631 ± 1514

 $\text{Cs}^{137} - 662 \text{ keV}$

hely	(csatorna)	$609,51 \pm 0,11$	$609,51 \pm 0,10$	$609,53 \pm 0,20$	$609,50 \pm 0,12$
amplitúdó	(impulzus)	54907 ± 321	55025 ± 287	53869 ± 368	53987 ± 313
félérték	(csatorna)	$5,673 \pm 0,057$	$5,709 \pm 0,054$	$5,870 \pm 0,100$	$5,880 \pm 0,061$
terület	(impulzus)	355437 ± 2079	355487 ± 1852	355608 ± 2292	355666 ± 2063

 $\text{Co}^{60} - 1333 \text{ keV}$

hely	(csatorna)	$1223,32 \pm 0,19$	$1223,32 \pm 0,24$	$1223,30 \pm 0,23$	$1223,31 \pm 0,22$
amplitúdó	(impulzus)	19720 ± 226	19627 ± 225	19503 ± 224	19224 ± 233
félérték	(csatorna)	$6,650 \pm 0,11$	$6,689 \pm 0,108$	$6,782 \pm 0,120$	$6,804 \pm 0,113$
terület	(impulzus)	155057 ± 1777	155140 ± 1778	155108 ± 1782	155131 ± 1876



6. ábra. A hasadási termékek háromszor ismételt 5-pontos simítású γ -spektruma

III. 3. Statisztikus ellenőrzés

A hatékonyság növekedésével a simított csatornatartalmak egyre jobban különböznek az eredetiektől. Hasznos információt ad a simításról ennek az eltérésnek az adott spektrumra vagy spektrumrészletre vonatkozó statisztikus ellenőrzése. Az ellenőrzés kritériumaként kiköthetjük [7], hogy a simított és az eredeti értékek eltérése az egyszeres statisztikus hibánál az összes mért pontok legalább 68%-ában, a kétszeres statisztikus hibánál pedig legalább 95%-ában legyen kisebb, azaz:

$$\frac{|S_i - y_i|}{\sqrt{y_i}} < \begin{cases} 1 & \text{minimálisan az esetek 68\%-ában,} \\ 2 & \text{minimálisan az esetek 95\%-ában.} \end{cases}$$

Ez a statisztikus ellenőrzés csak tájékozódásul szolgál, mert a fentieknél kisebb érték nemcsak a túlzott simítás miatt adódhat, hanem akkor is, ha a simítandó spektrumban jelentős tartományok vannak alacsony beütésszámmal (10 imp/csat körül), vagy ha az ellenőrzés csak kis spektrumtartományra (pl. egy fotocúcsra) terjed ki.

Tapasztalataink szerint a simítás (azaz m és r) megválasztásával baj lehet, ha az ellenőrzés előbbi követelményeinek megfelelő tartományban a statisztikus teszt értéke az előírtnál $\sim 10\%$ -kal kisebb.

IV. Következtetések

A spektrum-simítás a több ezer csatornás Ge(Li) γ -spektrumok analíziséhez általánosan ajánlható előkészítő eljárás. Alkalmazása még jó statisztikájú mérések-nél is hasznos, rossz statisztikánál pedig szinte nélkülözhetetlen. Segíti a számológépes spektrum kiértékelést is.

A simítás — mint általában a zajsűrítő eljárások — az eredeti eloszlást megváltoztatja. A Ge(Li) γ -spektrumoknál ez a félértékszélesség növekedésében és az amplitúdó csökkenésében a legszembetűnőbb. A csúcsok helyét és területét azonban a jól megválasztott simítás gyakorlatilag nem befolyásolja.

A simítás és ellenőrzése számológépre egyszerűen programozható, így a spektrum-előkészítés kényelmes és gyors.

Köszönetet mondunk Dr. Csikai Gyula professzornak (KLTE, Kis. Fiz. Tanszék) munkánk iránti állandó érdeklődéséért, Dr. Pócs Lajos tud. főmunkatársnak (KFKI), Dr. Daróczy Zoltán docensnek (KLTE, Analízis Tanszék), Jékel Pál és Rochlitz Szilveszter tudományos munkatársnak (KLTE, Valószínűség-számítási és Alk. Mat. Tanszék) matematikai problémáink megoldásában nyújtott segítségükért.

Függelék

A II. táblázatban az 5—11-pontos egyszerű és néhányszor ismételt, másod- harmadfokú polinomos simítások együtthatóit adtuk meg. Az ismételt simítások együtthatóit (8) szerint számítottuk. Feltüntettük a megfelelő N normálási tényezőket és a H hatékonyságot is.

II. TÁBLÁZAT

Simítási együtthatók, normálási faktorkok, hatékonyságok

2m+1		5-pontos simítás				7-pontos simítás			
r		1	2	3	4	1	2	3	4
N		35	1225	42 875	1 500 625	21	441	9261	194 481
H		0,697	0,629	0,596	0,574	0,577	0,515	0,488	0,469
együtthatók	i ± 0	17	595	17 927	593 875	7	147	2617	51 667
	1	12	336	12 564	420 720	6	108	2232	44 304
	2	-3	42	2 070	115 248	3	54	1278	27 336
	3		-72	-1 620	-51 408	-2	8	276	9 544
	4		9	-837	-35 910		-15	-171	-1 926
	5			324	0		-12	-234	-5 040
	6			-27	5 940		4	-105	-2 972
	7				-1 296			18	-672
	8				81			36	465
	9							-8	424
	10								24
	11								-96
	12								16

II. TÁBLÁZAT (folytatása)

2m+1		9-pontos simítás			11-pontos simítás		
r		1	2	3	1	2	3
N		231	53 361	12 326 391	429	184 041	78 953 589
H		0,505	0,449	0,426	0,455	0,404	0,383
együtthatók	i ± 0	59	13 629	2 655 569	89	38 181	13 783 979
	1	54	11 088	2 422 440	84	32 760	12 979 260
	2	39	7 392	1 796 058	69	24 804	10 733 058
	3	14	3 596	977 988	44	15 968	7 522 788
	4	-21	555	247 005	9	7 707	4 056 975
	5		-1 176	-123 156	-36	1 176	1 148 004
	6		-1 442	-246 378		-2 870	-459 030
	7		-588	-202 356		-4 176	-1 188 720
	8		441	-90 090		-3 087	-1 242 306
	9			5 390		-648	-889 408
	10			39 249		1 296	-404 001
	11			18 522			-5 940
	12			-9 261			183 465
	13						162 324
	14						34 992
	15						-46 656

IRODALOM

- [1] *E. T. Whittaker, G. Robinson*: The Calculus of Observations, Blackie and Son Ltd, London, 1926.
- [2] *A. G. Worthing, J. Geffner*: Treatment of Experimental Data, John Wiley and Sons, Inc., New-York, 1959.
- [3] *P. G. Guest*: Numerical Methods of Curve Fitting, University Press, Cambridge, 1961.
- [4] *G. U. Yule, M. G. Kendall*: Bevezetés a statisztika elméletébe, Közgazdasági és Jogi Könyvkiadó, Budapest, 1964.
- [5] *P. D. Lark, B. R. Craven, R. C. L. Bosworth*: The Handling of Chemical Data, Pergamon Press, Oxford, 1968;
- [6] *A. Savitzky, M. J. E. Golay*, Anal. Chem. 36, 1627, 1964.
- [7] *H. P. Yule*, Nucl. Instr. Meth., 54, 61, 1967.
- [8] *J. A. Blackburn*, Anal. Chem., 37, 1000, 1965.
- [9] *H. P. Yule*, Anal. Chem., 38, 103, 1966.
- [10] *J. T. Routti, S. G. Prussin*, Nucl. Instr. Meth., 72, 125, 1969.

NAGY NYOMÁSOK ÉS HATÁSUK EGYES ANYAGOK MÁGNESES TULAJDONSÁGAIRA*

PARDAVINÉ HORVÁTH MÁRTA
MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, (Budapest)

A dolgozatban rövid áttekintést nyújtunk a kísérleti fizika egyik kevésbé ismert, de rohamosan fejlődő új ágáról, a nagy nyomások fizikájáról. Ismertetjük a nagy nyomások létrehozásának legfontosabb módszereit, a nyomásmérés eszközeit és a nagy nyomások alkalmazási lehetőségeit, különös tekintettel a mágneses anyagokra. Az utóbbi témakörből bemutatunk néhány jellegzetes kísérleti eredményt.

Bevezetés

A nyomásnak a különböző fizikai jelenségekre és anyagi tulajdonságokra gyakorolt hatásával kapcsolatos első kísérleteket 1670 körül a Firenzei Akadémián végezték, ahol azt szerették volna megállapítani, hogy összenyomható-e a víz. Az alkalmazott nyomás nagysága és az ennek megfelelő térfogatváltozás kicsinsége miatt a kérdésre nem tudtak választ adni. A következő, 1762-ben Angliában végzett ilyen kísérlet már sikeres volt. Egészen a XIX. század végéig a folyadékok és gázok nyomás hatására bekövetkező térfogatváltozása, a p-V-T állapotábra viszonylag szűk hőmérséklet- és nyomástartományban történő vizsgálata volt a kísérletek témája. A XX. század első felében a vizsgálatok már kiterjedtek a fizikai jelenségek egész sorára, és a kísérleti technika fejlődésével egyre nagyobb nyomásokat értek el, egyre szélesebb hőmérséklettartományban. A kísérletek azonban rendszertelenek és koncepciótlanok voltak.

A II. világháború után a nagy nyomások fizikájában erőteljes fellendülés kezdődött, ami nem kis mértékben a vegyi és a hadiipar fejlődésének, a nagy szilárdságú anyagok ipari előállítása terén végbement fejlődésnek volt köszönhető. Ma már a fizikai vizsgálatok köre 400 ezer atmoszféra** nyomásig terjed, igen széles hőmérsékleti tartományban. Nagynyomású kísérletek végezhetők 0,05 K° és 5000 K° hőmérsékleten is. Lehetőség nyílt a szilárd testek számos tulajdonságának (elektromos ellenállás, Hall-effektus, optikai jellemzők, elektron-spin rezonancia, magrezonancia, mágnesezettség, termikus tulajdonságok, röntgen- és neutrontdiffrakció stb.) kísérleti vizsgálatára. A kutatók két lehetőség között választhat: az egyik lehetőség az, hogy ismert effektusok nyomásfüggését tanulmányozza, hogy a kis nyomáson észlelt effektus jellegének nagy nyomásokon bekövetkező kvantitatív megváltoztatásából következtessen az effektust kiváltó mechanizmusokra, a másik lehetőség új effektusok keresése sokféle anyag szisztematikus vizsgálata útján. A nagy nyomások

* Érkezett 1971. január 16.

** A nyomás elfogadott egysége a bar (10^6 din/cm²) mellett a nagy nyomások fizikájában egyaránt használják az atmoszféra (1 atm = 1,01 bar) és a kg/cm² = 0,98 bar egységeket is.

területén számtalan új jelenség felfedezése várható, pl. szigetelő-fém átmenetek, polimorf átalakulások sora, maximális olvadáspont létezése, vagy az egyik legérdekesebb jelenség, az elektronhéj teljes átrendeződésével járó fázisátalakulás, amelyet a céziumban és a cériumban már megtaláltak.

A kísérleti adatok rohamosan gyűlnek és azt mutatják, hogy a létező elméletek még a legegyszerűbb szilárd testek esetében is hiányosak. Az elmélet pl. nem tudja leírni a mérhető nyomástartományon belül a térfogat nyomásfüggését, aminek oka az lehet, hogy a lezárt elektronhéjak taszító kölcsönhatása csökken a héjátérő zsugorodása és a héjak átfedése miatt. Nincs elmélet, amely helyesen írná le a szilárd testek allotróp átalakulásait, nemhogy nagy nyomáson, de még atmoszférikus nyomás mellett sem. Vannak azonban olyan területek is, ahol az elmélet annyira fejlett, hogy mennyiségileg is összehasonlítható a kísérlettel. Például az ionos kristályok energiaszintjeinek nagy nyomások hatására előálló eltolódásai jól számíthatók.

A mágnesség elmélete sincs olyan állapotban, hogy a nagy nyomásokon végzett kísérletek eredményeit kvantitatíven összevessük az elmélettel. Csak arra van lehetőség, hogy fémekben vagy ötvözetekben nyomás alatt mért fázisátalakulások paramétereit valamilyen korrelációba hozzuk az elektronok kicserélődési kölcsönhatásával. A kicserélődési kölcsönhatások tanulmányozásához igen fontos lenne a rácsparaméter változtatása, amelyet azonban megnehezít az, hogy a legtöbb ferromágneses anyagnak kicsi a kompresszibilitása.

A hőmérséklet és a nyomás hatásának egyidejű vizsgálata is sokat segíthet a jelenségek megértésében. A rácsrezgések és az elektronok kölcsönhatásából származó effektusok gyakran felülmúlják a hőtágulás hatását. Állandó térfogat mellett mérhető a hőmérséklet hatása olyan fizikai paraméterekre, amelyeket különben a hőtágulás elfed. Ilyen pl. az ónban a Knight-eltolódás hőmérsékletfüggése [1].

Az impulzusteknika, a lökéshullámok által létrehozott extrém nagy, néhány megabart elérő nyomások már eddig is nagyon szép és váratlan eredményeket adtak, függetlenül attól, hogy ezek a nyomások csak néhány μsec ideig hatnak. Egyes fázisátalakulásokat szinte könnyebb ily módon megfigyelni. Ma ez még csak a „kevesek technikája”, nagyon sok megoldásra váró problémával, de a rohamléptekkel fejlődő technika valószínűleg sok új lehetőség forrása lesz.

1. Nagynyomású kísérletek technikája

1.1. Nagy nyomások létrehozása

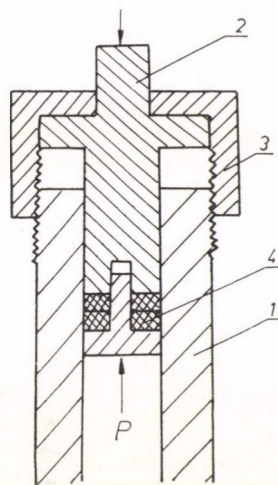
Az első kérdés, ami a nagy nyomások létrehozásával kapcsolatban felmerül: miből készüljön a nagynyomású kísérleti kamra. Az anyaggal szemben támasztott alapvető követelmény, hogy számottevő deformáció nélkül képes legyen igen nagy feszültségeket elviselni. Ilyen anyagok az acélok és a gyorsacélok, amelyek megfelelő hőkezeléssel igen nagy szilárdságúvá és keménységűvé alakíthatók. A nagy nyomások tartományában wolframkarbidot is használnak, és gyakran a fenti anyagokkal kombinálják. Nagyon sokszor fontos, hogy a nyomáskamra anyaga ne legyen mágneses. Erre a célra igen megfelelő a berilliumbronz, amely gyengén diamágneses és megfelelő hőkezelés után kb. 20 kbar nyomásig használható. A legutóbbi időkben jelentek meg az első közlemények titánötvözetek felhasználásáról. Ezek az ötvözetek gyenge hőmérsékletfüggésű paramágneses anyagok [2].

A nyomás nem közvetlenül hat az anyagmintára. A nyomást közvetítő közeg adja át és ezzel a közeggel szemben elég súlyosak a követelmények. Kívánatos, hogy a nyomást hidrosztatikusan adja át, kis kompresszibilitású, rossz hő- és elektromos vezető legyen; ha szilárd anyag közvetíti a nyomást, akkor olvadáspontja magas legyen és a nyomás hatására magasabb hőmérsékletek felé tolódjon el; ezenkívül kémiaiilag közömbös és hőálló legyen. A nyomásátadó közeg lehet gáz (Ar, N₂); lehet folyadék (petróleum-olaj keverék), de itt a hidrosztatikusság csak 25–30 kbar nyomásig tart, mert e fölött a folyadékok vagy megszilárdulnak, vagy igen nagy lesz a viszkozitásuk. A legmagasabb hőmérsékletek és nyomások tartományában szilárd nyomásátadó közeget használnak. A legmegfelelőbb erre a célra a pirofillit, a zsírkő és a hexagonális szerkezetű bór-nitrid.

A nyomást a kamrában meg kell tartani, és ez azt jelenti, hogy a tömítések igen sok problémát okoztak a kutatóknak. A tömítéseknek egyszerre kell kompresszibiliseknek és kis belső súrlódásúaknak lenniük. Eddig csak a két követelmény kompromisszumát tudták megvalósítani. A tömítéseknek belülről nagy, kívülről kis nyomást kell elviselniük, tehát nagy kell hogy legyen a szilárdságuk. *Bridgman*, a nagy nyomások technikájának legkiemelkedőbb kutatója a tömítésekre is talált megoldást, és a „kompenzálatlan felület” elvét ma gyakorlatilag minden nagynyomású berendezésben alkalmazzák. Az elvet az 1. ábra szemlélteti. Az ① hengerben tömíteni kell a ② jelű dugattyút. A kezdeti tömítést a ③ menetes sapka meghúzásával lehet elvégezni. Ha nő a nyomás, akkor a dugattyú *A* alapterületére ható $F = p \cdot A$ erő egyensúlyt tart a ④ tömítőgyűrűre ható $F' = p' \cdot A'$ erővel. Mivel $A' < A$ (rendszerint $A = 1,25A'$), így $p' > p$, tehát elvben a nyomás elvesztése nem lehetséges. A tömítések problémakörébe tartozik az elektromos vezetékek tömítésének beépítése a nyomáskamrába, sőt arra is van lehetőség, hogy rádiófrekvenciás energia bevitelét is megvalósítsák.

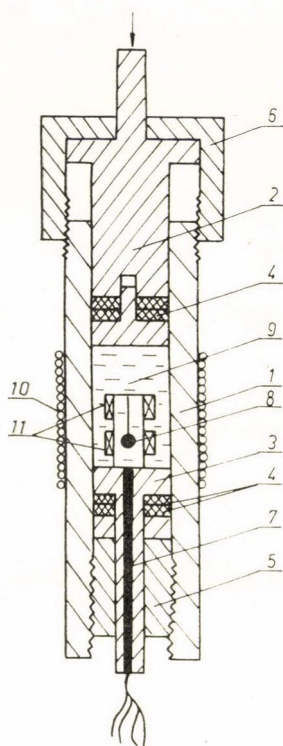
Alacsony hőmérsékleteken jól használható *Lazarev* és *Kan* „jégbombája” (1944). Ha vízzel töltött, nagynyomású kamrát lassan lehűtenek, a kamra belsejében egyenletes nyomáseloszlás alakul ki. Cseppfolyós hélium hőmérsékletén ($T = 4,2 \text{ K}^\circ$) kb. 2 kbar nyomás hozható így létre. Az elektromos kivezetéseket vízzel töltött kapillárisokon keresztül valósítják meg. Nem túl magas, (kb. 100 K°) hőmérsékletig használható a szilárd nitrogénnel, 63 K° hőmérsékleten megtöltött kamra, amelyben melegítéssel állandó térfogaton nyomásnövekedést kapunk.

Az egyik legkényelmesebb és legerterjedtebb eszköz nem túl nagy (20 kbar) nyomások létrehozására, tetszőlegesen alacsony hőmérséklettől kb. 400 K° -ig a vízmentes petróleum-olaj keverékkel töltött „bomba”. Felépítését a 2. ábra szemlélteti. Az ① vastagfalú hengerben, amelyet alsó végén az ⑤ csavarral rögzített ③ dugó zár le, a következő módon hozzuk létre a nyomást: a hengerben a ② tömített dugattyú mozog, amelynek helyzetét a ⑥ menetes zárósapka rögzítheti. Ha az olajjal megtöltött bombát prés, vagy nagyáttételű satú pófái közé helyezzük, a dugattyú benyomásával a kívánt hidrosztatikus nyomásig komprimáljuk az olajat. A dugattyút

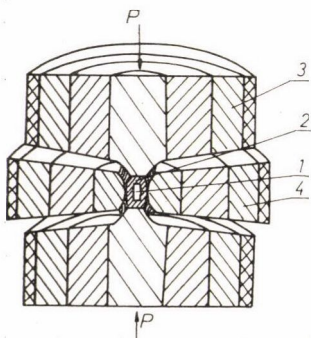


1. ábra. „Kompenzálatlan felület” elve

rögzítjük, a bomba kivehető a présből és a mérőberendezéshez illeszthető. A mérések állandó nyomáson történnek; különböző nyomásoknak a dugattyú különböző helyzetei felelnek meg. A mérendő anyagmintát ⑧ megfelelő módon rögzítjük a bombában, a méréshez szükséges elektromos kivezetések a ⑦ kónuszos furaton mennek át. Ezek tömítése nagy szilárdságúra polimerizált, jól szigetelő araldittal történhet.



2. ábra. Nagynyomású bomba



3. ábra. „Belt” típusú nagynyomású kamra

A tömítéseket a kompenzálatlan felületek elve alapján a ④ teflon és vörösrézgyűrűk biztosítják. A 2. ábra mágneses szuszceptibilitásmérésre alkalmas bombát mutat be. A ⑩ gerjesztő tekercs által keltett változó mágneses térben a mérőtekercsekkel ⑪ a minta ⑧ mágnesezettségváltozásának megfelelő indukált feszültséget detektálhatjuk. A mérési hőmérséklet változtatása külső fűtőtest, illetve hűtőközeg, vagy belső grafitfűtőtest alkalmazásával történhet. Ha a berillium-bronzból készült bomba belső átmérője 4 mm, külső átmérője 23 mm, az elérhető nyomás 20 kbar.

Érdemes megemlíteni a 77 K° és 500 K° közt használható, 12 kbar nyomást adó, titánötvözetből készült bombát, amelynek belső furata 3 mm és súlya mindössze 3,5 g. Ez a bomba mágneses mérlegben történő felhasználásra készült [2].

Szintén *Bridgman* nevéhez fűződik a „belt” (öv) néven ismert berendezés. Ez, és ennek változatai már határozottan nagy nyomásokon (>100 kbar) és igen magas hőmérsékleteken (1000 C°) is használhatók. Elvi felépítését a 3. ábra mutatja. A berendezésben a nyomás folyamatosan változtatható. Az ① minta két kúpos ③ „dugattyú” közt helyezkedik el, és az egész kamra nagy teljesítményű présben van. A ④ „belt”, azaz öv, körülveszi a mintakamrát, mintegy előfeszíti, összeszorítja a berendezést. Ha kívülről nyomófeszültséget alkalmazunk, a belső nyomás előbb kiegyenlíti a külső nyomást és csak azután lépnek fel a tágító feszültségek. Ezt a célt szolgálja az is, hogy a kamra testét és az övet több koncentrikus, esetleg különböző anyagokból készült réteg alkotja. A nyomásátadó közeg szilárd és körülveszi az anyagmintát. A pirofillitbe grafit vagy fém fűtőtest építhető be; a fűtőáram bevezetése a kúpos dugattyún keresztül történik. Az elektromos kivezetések a pirofilliten keresztül, talcummal tömítve, az öv és a dugattyú közt haladnak. Az ilyen berendezésekhez, ha 1 cm³ térfogatban 100 kbar nyomást akarunk elérni, 1000 tonnás prést kell alkalmazni.

Még nagyobb nyomásokra (400 kbar, 3000 C°) alkalmazhatók a tetraéder vagy oktaéder alakú kamrák, amelyeknek minden oldallapját külön préssel nyomják.

1. 2. A nyomás mérése

A nagynyomású kísérleti adatok interpretációja csak akkor lehetséges, ha a kísérleti nyomásmérő megfeleltethető a termodinamikai skálának. Ennek a megfeleltetésnek az elérésére nyomásetalonként dolgoztak ki. A primér normália a súlyterhelésű nyomásmérő. Elvét a 4. ábra szemlélteti. A terhelt dugattyút egyensúlyban tartják hidraulikus nyomással, ami a dugattyú alapterületére hat. A nyomás a kiegyensúlyozó súly és a dugattyú alapterületének hányadosa. A gyakorlati megvalósítás sokkal bonyolultabb, mivel nagy nyomásoknál deformálódik a henger, és megváltozik a dugattyú effektív felülete.

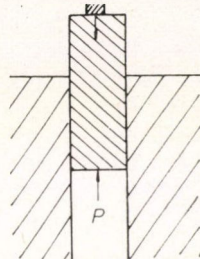
Az egyes kísérletek közben a nyomás mérésére szekunder normáliákat használnak. Ezek valamilyen fizikai mennyiség adott nyomásra bekövetkező, reprodukálható és jól mérhető változásán alapulnak. Nyomás hatására változik a fémek ellenállása; ezen alapul a manganin ellenállás-manométer használata. A megfelelően hőkezelt manganin-huzal ellenállása 13 kbar nyomásig lineárisan kb. 25 kbar nyomásig a linearitástól néhány %-ra eltérően, jól reprodukálhatóan változik. Az ellenállás „nyomástényezője”, amelynek hőmérsékletfüggése elhanyagolható:

$$\frac{1}{R_0} \frac{dR}{dp} \sim 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ bar}^{-1}.$$

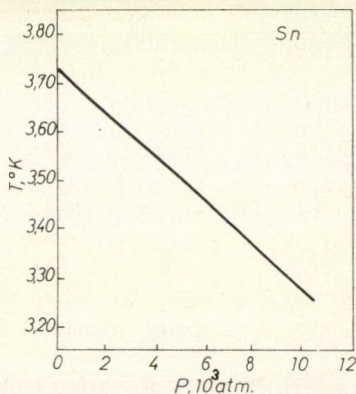
Atmoszférikus nyomáson 100 ohm ellenállású manganin-manométer ellenállása 1 kbar nyomásváltozás hatására 0,25 ohmot változik. A manganin hőfoktényezője a szobahőmérséklet környékén viszonylag kicsi. Itt a manganin ellenállásának a hőmérséklet függvényében elég lapos maximuma van. Más hőmérsékleten a hőfoktényezőt a mérésnél figyelembe kell venni.

Alacsony hőmérsékleten igen jó manométerek a szupravezető anyagok, mivel átalakulási hőmérsékletük és állandó hőmérsékleten kritikus mágneses terük nyomásfüggő. Pl. az ólom kritikus hőmérséklete, $T_c = 7,18 \text{ K}^\circ$, $dH_c/dp = -9,95 \cdot 10^{-3} \text{ gauss/atm}$; a tantálé $T_c = 4,4 \text{ K}^\circ$, $dT_c/dp = -2,65 \cdot 10^{-6} \text{ fok/atm}$, $dH_c/dp = 0,90 \cdot 10^{-3} \text{ gauss/atm}$.

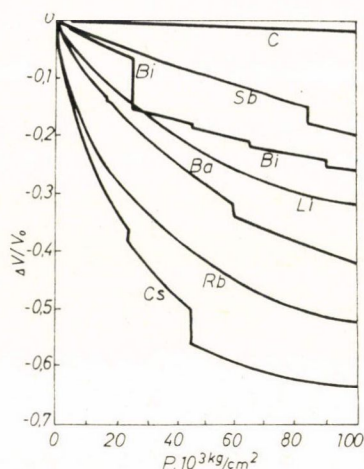
Nagy nyomásokon jól definiált polimorf átalakulások adják a hitelesítési pontokat. A nyomáskamrákat rendszerint ezek alapján kalibrálják, a nyomás hatására bekövetkező térfogat- vagy ellenállásváltozást mérik. Ilyen hitelesítő pontok a Bi, Cs, Ba átalakulási pontjai. A hőmérsékletet általában a nyomáskamrába beépített termopárral mérik. A nyomás hatását a termofeszültségre még Bridgman [4] megmérte, az ő méréseit ismételte meg és egészítette ki Bundy [5]. A 7. ábra a nyomás hatására bekövetkező termofeszültségváltozást ábrázolja 100 C° hőmérsékletkülönbség mellett.



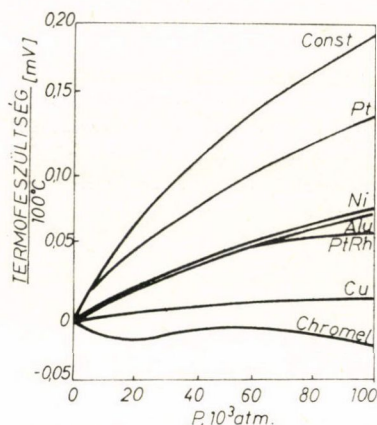
4. ábra. Súlyterhelésű manométer elve



5. ábra. Az ón kritikus hőmérsékletének nyomásfüggése [42]



6. ábra. Néhány anyag nyomás hatására bekövetkező térfogatváltozása [43]



7. ábra. A termofeszültség változása nyomás hatására [5]

1. 3. Speciális berendezések

A kísérleti technika ma már annyira fejlett, hogy nem jelent különösebb nehézséget olyan kísérletek elvégzése sem, ahol a vizsgálandó paraméter méréséhez különleges követelményeknek kell eleget tenni.

A legtöbb nagynyomású mérés értelmezéséhez szükség van a kompresszibilitás ismeretére. Nagy nyomásokon végzett röntgen-diffrakciós mérések közvetlenül szolgáltatják a kompresszibilitást, de nem érdektelen pl. a fázisátalakulások röntgen-vizsgálattal történő nyomon követése sem. Ezeket a célokat szolgálják a nagynyomású röntgen-diffrakciós berendezések [6], amelyekkel 100–150 kbar nyomástartományban lehet dolgozni. Ma már ezeknek a kísérleteknek az eredményeként a periódusos rendszer elemei nagy többségének ismerjük a kompresszibilitásait. A röntgensugarat berillium-kúpon keresztül vezetik be a kamrába; nyomásátadó közegként általában litiumot használnak.

A Mössbauer-effektus vizsgálatához szintén berillium ablakot használnak, míg neutron-diffrakciós vizsgálatokhoz a neutronok számára átlátszó ablak alumíniumból készül.

Drickamer [5, p. 16] 3–400 kbar nyomásig végzett optikai vizsgálatokat. Félvezetőkben abszorpciós éleket mért „belt” típusú berendezésben. A fénysugarat a támasztógyűrűben elhelyezett ablakon vezette be a mintához. Az ablak 20 kbar nyomáson megolvastott, feszített, átlátszó kősz-kristály volt.

2. Nagy nyomások hatása az anyagok mágneses tulajdonságaira

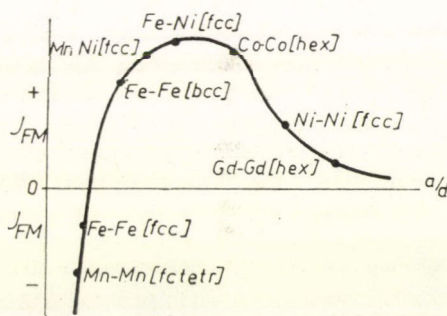
Elég meglepő, hogy rendszeres, céltudatos kutatómunkáról, amely a nyomás mágneses tulajdonságokra gyakorolt hatásának vizsgálatára irányul, alig beszélhetünk. Az elmélet sem tett egyelőre sokat azért, hogy az utóbbi húsz év folyamán

összegyűlt, rendezetlen adathalmazt elemezze és céltudatos kutatásra ösztönözzön. Pedig a nyomás hatásának vizsgálatával bepillantást nyerhetünk az elektronok közti kölcsönhatás mechanizmusába, amely a mágnesség alapkérdéseit érinti. Ezt a kölcsönhatást — elég önkényesen — két részre oszthatjuk: *a)* az atomon belüli, amely az átmeneti fémek *d* és *f* héjában megakadályozza az elektronok spinmomentumának teljes kompenzálódását és ezzel létrehozza az atomok mágneses momentumát; *b)* az atomok közti kölcsönhatásra, amely ezeket az atomi momentumokat rendezi. Adott hőmérséklet alatt ez a kölcsönhatási energia összemérhető a termikus energiával, és ez a hőmérséklet (a Curie, Néel-pont) az atomok közt ható erőkre jellemző. Mérni lehet a nyomás hatását a telítési mágnesezettségre, ez az atomon belüli kicserélődési kölcsönhatásról ad felvilágosítást; és az átalakulási hőmérséklet nyomásfüggését, ami viszont az atomok közti kölcsönhatásról ad információt.

2. 1. A kicserélődési energia távolságfüggése

Az elmélet már régóta figyelembe veszi, hogy a kicserélődési integrál távolságfüggő; ezt tükrözi a 8. ábrán látható jól ismert Bethe—Slater görbe. A függőleges tengely a kicserélődési integrált, amely a kicserélődési energiával, illetve a T_c , T_N átalakulási hőmérséklettel arányos, a vízszintes tengely pedig a legközelebbi szomszédok közti távolság és a betöltetlen héj átmérőjének arányát ábrázolja. Nem egészen indokolt, hogy egy görbén ábrázoljuk a különböző kristályszerkezetű anyagokat, de arra jó ez az eljárás, hogy a nyomás hatására bekövetkező változások előjelét és hozzávetőleges nagyságát megadja, ha feltesszük, hogy nyomás hatására csak az atomok közötti távolság változik.

Az első méréseket a mágnesezettség nyomásfüggésére Nagaoka és Honda [7] végezte 1898-ban. Céljuk az volt, hogy magnetostrikciós méréseiket az



8. ábra. A kicserélődési integrál távolságfüggése

$$\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial H} = -D \frac{\partial \sigma}{\partial p}$$

összefüggés alapján ellenőrizték. (D az anyag sűrűsége; V a térfogat, σ a telítési mágnesezettség). Vason és nikkelen mértek kb. 250 bar nyomáson, kis mágneses térben és megállapították, hogy vasban $\partial \sigma / \partial p < 0$, míg nikkelen $\partial \sigma / \partial p > 0$, későbbi eredményeik szerint [8] $\partial \sigma / \partial p(\text{Ni}) < 0$. Ebert és Kussman [9] szobahőmérsékleten, 2 kOe térben, 3 kbar nyomásig mérték a vas és nikkelen relatív mágnesezettségváltozását. Szerintük

$$\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} = -6 \cdot 10^{-7} / \text{bar} \text{ vasra és } -2,8 \cdot 10^{-7} / \text{bar} \text{ nikkelenre. Galperin [10] újabb}$$

mérései szerint vasra $\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} = -1,70 \cdot 10^{-7} / \text{bar}$, míg Kowel [11] szerint ez a mennyiség $-2,78 \cdot 10^{-7} / \text{bar}$. Stacey [12] mérte a nikkelen mágnesezettségváltozását és 1 kbar nyomásra $+360 \cdot 10^{-7} / \text{bar}$, 10 kbar hatására $50 \cdot 10^{-7} / \text{bar}$ értéket kapott (Az általa alkalmazott nyomás nem nevezhető hidrosztatikusnak, ugyanis az anyagmintát

a mágnespofákkal szorította össze.) *Gugan* [13] mérte a nikkeltérfogategységre eső mágnesezettségének (M_s) változását, és $\frac{1}{M_s} \frac{\partial M_s}{\partial p} = 0$ értéket kapott, ami egyezik *Klitzing* és *Gielessen* [14] eredményével. Az egységnyi anyagmennyiségre vonatkozó mágnesezettség σ_s közvetlen kapcsolatban van az atomi momentumokkal, ugyanis

$$\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} = \frac{1}{M_s} \frac{\partial M_s}{\partial p} + \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{1}{M_s} \frac{\partial M_s}{\partial p} - \kappa,$$

ahol κ a kompresszibilitás [$\kappa_{Ni} = -5,5 \cdot 10^{-7}/\text{bar}$]. Így ezekből a nikkelle $\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} = -5,5 \cdot 10^{-7}/\text{bar}$ adódik.

Kouvel és társainak [11] mérései polikristályos nikkelle $+1,31 \cdot 10^{-7}/\text{bar}$ értéket, egykristályra pedig $-1 \cdot 10^{-7}/\text{bar}$ értéket adtak. Az utóbbi adat egyezik a térfogati magnetostriktióból számolt értékkel.

Ezek a mérések szobahőmérsékleten történtek, ahol a mérés technika viszonylag egyszerű. Ez a körülmény erősen lecsökkenti az eredmények értékét, mivel ha egy

adott hőmérsékleten mérjük a telítési mágneszettség nyomásfüggését, az több effektus szuperpozícióját tükrözi. Ha feltesszük, hogy a telítési mágneszettség hőmérsékletfüggése a következő alakú:

$$\sigma_s = \sigma_0 f\left(\frac{T}{T_c}\right),$$

és f explicite nem függ a nyomástól, akkor σ_s megfigyelt változása vagy σ_0 (a telítési mágneszettség $T=0\text{ K}$ hő-

mérsékleten), vagy T_c nyomásfüggését tükrözi. A két mennyiség kapcsolatát a következő kifejezés szolgáltatja:

$$\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} = \frac{1}{\sigma_0} \frac{\partial \sigma_0}{\partial p} - \frac{T}{\sigma_s} \left(\frac{\partial \sigma_s}{\partial T} \right)_p \frac{1}{T_c} \frac{\partial T_c}{\partial p},$$

$$1 + \frac{3\alpha T}{\kappa} \frac{1}{T_c} \frac{\partial T_c}{\partial p},$$

ahol α a lineáris hőtágulási együttható, κ a kompresszibilitás.

A Curie-pont nyomás hatására bekövetkező változását *Patrick* [15] több anyagon is megmérte. Eredményeit a 9. ábra szemlélteti. Mérései azt mutatták, hogy a vasban $\partial T_c / \partial p = 0 \pm 0,1$ fok/bar. *Esztrín* [16] 1969-ben szintén nyomásfüggetlen Curie-pontot mért. Ezek az adatok nem egyeznek a Bethe—Slater görbével, mert ha feltesszük, hogy a nyomás az atomok közötti távolságra hat, akkor a vasban a térfogatcsökkenés igen erős Curie-pont csökkenéssel járna. Lehet, hogy ezt a változást az atomon belüli kölcsönhatások egyenlítik ki, azaz a d -héj átmérője csökken.

Szerző	$\frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} \text{ bar}^{-1}$	
	Fe	Ni
Nagaoka [7, 8]	<0	>0
Ebert [9]	$-6 \cdot 10^{-7}$	<0
Galperin [10]	$-1,7 \cdot 10^{-7}$	$-2,8 \cdot 10^{-7}$
Kouvel [11]	$-2,78 \cdot 10^{-7}$	$+1,31 \cdot 10^{-7}$
Stacey [12]		egy kristály $-1,0 \cdot 10^{-7}$
Gugan [13]		$+360 \cdot 10^{-7}$
Klitzing [14]		$-50 \cdot 10^{-7}$
		$(-5,5 \pm 4) \cdot 10^{-7}$
		$(-5,5 \pm 1,2) \cdot 10^{-7}$

Patrick [15] nikkelle $\partial T_c / \partial p = +0,35$ fok/kbar értéket kapott. Ez valószínű, mert ha a másodrendű fázisátalakulásra alkalmazzuk az Ehrenfest-egyenletet:

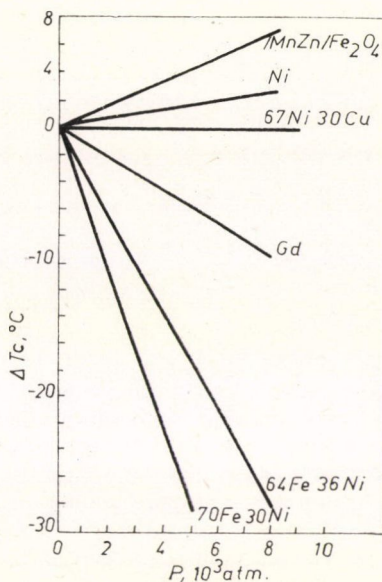
$$\frac{1}{T_c} \frac{\partial T_c}{\partial p} = \frac{3\Delta\alpha}{D\Delta C_m},$$

ahol $\Delta\alpha$ a lineáris hőtágulás, ΔC_m a fajhő ugrása a Curie-pontban és $\Delta\alpha < 0$, $\Delta C_m < 0$, akkor ebből következik, hogy $\partial T_c / \partial p > 0$. Ha ez így van, akkor a legtöbb mérésből kapott $\partial \sigma_s / \partial p < 0$ arra mutat, hogy $\partial \sigma_0 / \partial p < 0$. Patrick [15] által a gadoliniumra kapott negatív $\partial T_c / \partial p = -1,2$ fok/bar érték sem összeegyeztethető a Bethe—Slater görbével.

Az ötvözetek közül a Fe-Ni rendszert vizsgálták a leggyakrabban. Közismert, hogy a 30% Ni-t tartalmazó ötvözeteknek szobahőmérséklet környékén anomálishan nagy pozitív térfogati magnetostrikciója van, ezért várható, hogy a mágnesezettség erősen csökken a nyomás növelésével. Ezt Ebert és Kussman [9], valamint Guban [13] mérései igazolták, míg Patrick [15] és Kaneko [17] a Curie-pont nyomás hatására bekövetkező erőteljes csökkenését állapították meg. A mágnesezettség erős változása nem magyarázható egyedül a Curie-pont változásával, σ_0 értéke is meg kell, hogy változzon. Kondorszkij [18] alacsony hőmérsékleten végzett mérései igazolták a σ_0 változását.

Kouvel [11] szerint a rendezetlen, kb. 20% mangánt tartalmazó Ni-Mn ötvözetben nyomás hatására bekövetkező nagy mágnesezettségváltozást nem az atomi momentumok nagyságának, hanem irányának megváltozása okozza. Ez azzal magyarázható, hogy az anyagban a Ni-Ni és Ni-Mn párkölcsönhatások ferromágnesesek, a Mn-Mn kölcsönhatások antiferromágnesesek. A rendezetlen ötvözetben a nagyszámú antiferromágneses Mn-Mn kölcsönhatás a momentumok bizonyos rendeződését idézi elő. Rendezetlen ötvözetben lehetnek olyan atomok, amelyek helyén a kicserélődési tér nagyon kicsi. A kis kicserélődési teret érző momentumok iránya a nyomás hatására egyre erősödő Mn-Mn antiferromágneses kölcsönhatás miatt könnyen megváltozhat. Megfelelő hőkezeléssel rendezett Ni_3Mn ötvözet alakul ki, amelyben a Mn-Mn párok, tehát az antiferromágneses kölcsönhatások száma erősen csökken, nagyobb lesz a telítési mágnesezettség és ez kevésbé függ a nyomástól.

A ritka földfémekben is érdekes a nyomás hatása. Itt a 4f-héj átmérője kb. 10-szer kisebb, mint az atomtávolság, nincs köztük átfedés és így nem lehetséges f-f közvetlen kicserélődés. A mágneses tulajdonságokat a mágneses törzseknek a vezetési elektronokon keresztül bekövetkező indirekt kölcsönhatása magyarázza. A változatos mágneses szerkezetű ritka földfémek mágneses fázisátalakulási hőmérséklete arányos ennek az indirekt kölcsönhatásnak az erősségével. Elméleti modellek a kölcsönhatás erősségének az atomtávolságtól való függésére egészen jó



9. ábra. A Curie-pont nyomásfüggése [15]

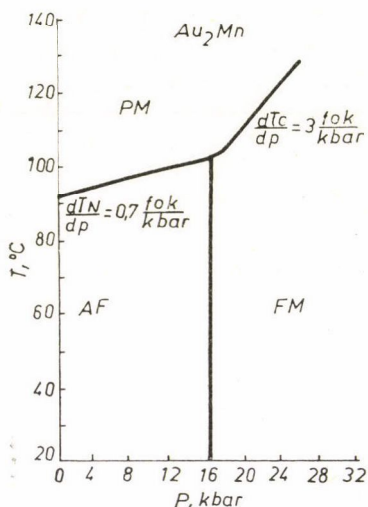
egyeztést adnak. Gd-tól Ho-ig a kicserélődés erőssége az atomtávolság és az f -héj átmérője hányadosának függvényében monoton nő [19]. Igen érdekes, hogy egyes ritka földfémekben és ötvözeteikben [20] az átalakulási hőmérséklet nyomásfüggése nem lineáris; néhány kbar nyomásnál maximumot mutat. Ezt azzal magyarázzák, hogy a Brillouin-zónában az állapotsűrűség és a zóna alakja is változik a nyomás hatására [21]. A mágnesezettség nyomás hatására bekövetkező változását Bloch és Pauthenet [22] a vezetési elektronoknak tulajdonítják.

2. 2. Mágneses fázisátalakulások

Egy anyag mágneses szerkezetét a szabad energia minimumfeltétele határozza meg. Mágneses anyagok szabad energiája függ a hőmérséklettől, a nyomástól és a mágneses tértől. Ha ezek a paraméterek változnak, akkor mágneses fázisátalakulás útján az anyagban új, energetikailag kedvezőbb mágneses szerkezet alakulhat ki. A mágneses fázisátalakulások végbemehetnek rendezett és rendezetlen, vagy két különböző rendezett mágneses szerkezetű állapot között, lehetnek első- vagy másodrendűek.

A másodrendű fázisátalakulások klasszikus példája a mágnesesen rendezetlen fázisból a Curie-pontban kialakuló rendezett mágneses szerkezet.

Másodrendű rend-rend átalakulás jön létre az Au_2Mn intermetallikus vegyületben. Helikoidális antiferromágneses szerkezetből $H_c \cong 10$ kOe mágneses térben az anyag ferromágnessé alakítható. Többen megmérték ennek a kritikus térnek a nyomásfüggését, és $dH_c/dp = -0,68$ Oe/bar értéket kaptak [23]. Ennek az értéknek $H_c=0$ térre történő extrapolálása alapján várható, hogy az Au_2Mn külső tér nélkül, egyedül nyomás hatására is ferromágneses állapotba vihető át. Wayne és Smith [24] mérték az Au_2Mn p – T fázisdiagramját, és bebizonyították ennek az átalakulásnak a létezését. Az átalakulás másodrendű, de véges szélességű nyomástartományban megy végbe. Itt az eredetileg spirális mágneses szerkezet előbb ernyőszerűen összezsugorodik (H vagy P hatására), ha a teret vagy a nyomást tovább növeljük, ez az ernyő lassan összezsugorodik a telített ferromágneses állapot bekövetkeztéig.



10. ábra. Az Au_2Mn vegyület mágneses fázisábrája [24]

A kicserélődési kölcsönhatás távolságfüggése eredményezheti azt is, hogy mágneses fázisátalakulások elsőrendűek lesznek. Bean és Rodbell [25] megmutatta, hogy nagy kompresszibilitású anyagokban, ahol dT_c/dp nagy, a mágneses rendezetlenség átalakulás lehet elsőrendű.

Hogy adott esetben az átalakulás milyen típusú, az a kicserélődési és a rugalmas energia viszonyától, a kompresszibilitástól (κ) és a kicserélődési energia nyomás hatására bekövetkező változásától (β) függ.

Ha egy rendszer kicserélődési energiájának távolságfüggését molekuláris tér

közelítésben

$$T_c = T_0 \left[1 + \beta \frac{V - V_0}{V} \right]$$

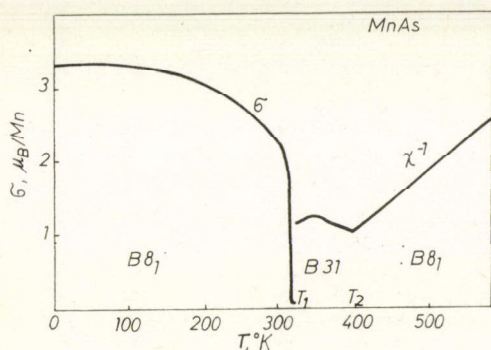
alakban írjuk fel, majd a szabad energia minimalizálása alapján meghatározzuk a térfogat és a mágnesezettség egyensúlyi állapotait, akkor ezek kifejezéseiben szerepelni fog az

$$\eta = \frac{3}{2} N k \chi T_0 \beta^2$$

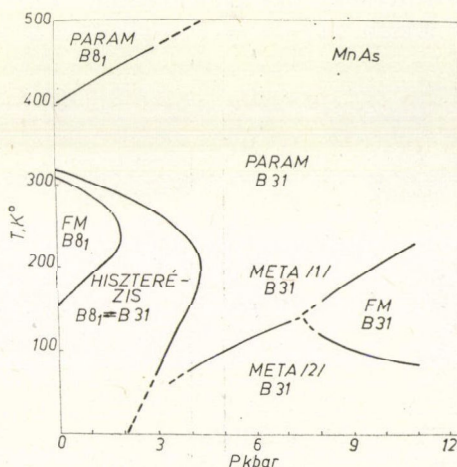
paraméter. Ha $\eta > 1$, akkor az átalakulás elsőrendű, míg $\eta < 1$ esetében az átalakulás másodrendű lesz [25]. Néhány anyagra mérték ezt a paramétert és jó egyezést találtak az elmélettel [26].

	T_c, T_N K°	$\partial T_c / \partial p$ fok/kbar	α	β	η	Az átalakulás rendje
MnAs	313	-16,0	4,5	12	1,82	FM → PM I
MnTe	310	2,3	2,3	-3,3	0,45	AF → PM II
MnP	291	1,2	1,5	-2,7	0,014	FM → PM II
CrTe	343	-6,2	2,2	8	0,34	FM → PM II
MnAu ₂	365	0,68	1,3	1,4	0,004	AF → PM II

Elsőrendű mágneses rend-rendeztetlenség fázisátalakulás megy végbe a MnAs-ben. Menyuk és munkatársai [27] megmérték az anyag p — T — H diagramját. Atmoszférikus nyomáson a 11. ábra szemlélteti a MnAs mágneses tulajdonságait. T_1 hőmérsékleten az anyag elsőrendű fázisátalakulással paramágnessé válik, a két állapot között van egy rejtélyes szakasz, Néel pontra emlékeztető szuszceptibilitás maximum-

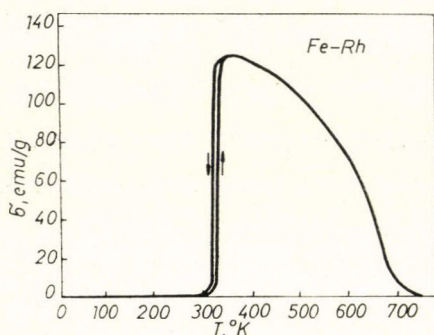


11. ábra. A MnAs mágnesezettségének hőmérsékletfüggése atmoszférikus nyomáson [27]



12. ábra. A MnAs mágneses p — T állapotábrája [27]

mal és más kristályszerkezettel. Az antiferromágneses rendet a neutrondiffrakciós vizsgálatok [28] kizárják, viszont megállapítható, hogy a két szerkezetben más a Mn-atomok állapota, az alacsony spinű állapotból magas spinűbe kerülnek át. T_1 hőmérsékleten a hexagonális $B8_1$ szerkezet ugrásszerűen ortorombikus $B31$

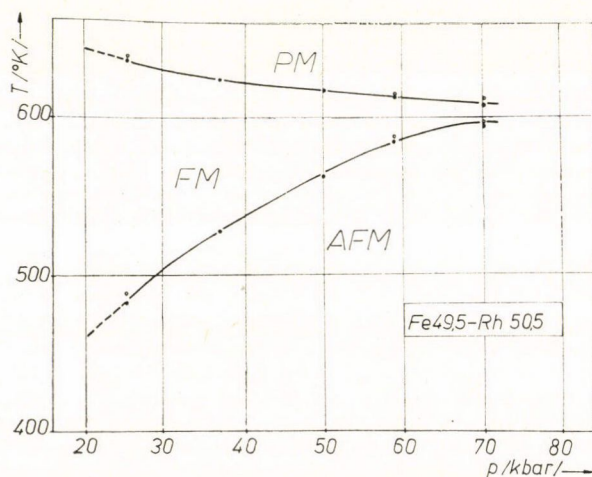


13. ábra. A Fe—Rh ötvözet mágnesezettségének hőmérsékletfüggése atmoszférikus nyomáson

szerkezetbe megy át, T_2 -ben ez folyamatosan visszaalakul a $B8_1$ szerkezetbe. Az anyag mágneses p — T állapotábráját mutatja be a 12. ábra [27]. Ha a nyomást 0-ról 2 kbar-ra növeljük, az anyagok 0 K° környékén paramágneses $B31$ közbülső szerkezettel, majd 430 K° -on átmegy a $B8_1$ paramágneses szerkezetbe. 10 kbar nyomásnál, 0 K° hőmérsékleten az anyag metamágneses, tehát mágneses térrel telíthető paramágneses állapotban van, ez az állapot a hőmérséklet növelésével spontán ferromágnessé rendeződik, majd a $B31$ fázis Curie-pontján át a vizsgált tartományban $B31$ paramágneses fázisban marad. A meta (1) fázisban $dH_c/dT > 0$, a meta (2) fázisban $dH_c/dT < 0$. Ha adott hőmérsékleten a nyomást csökkentve indulunk el, azt

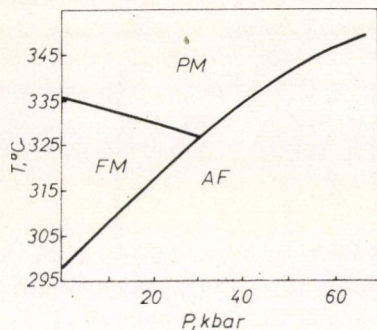
tapasztaljuk, hogy a $B31$ fázis stabil marad egészen kis nyomásokig és csak ott következik be az elsőrendű para-ferromágneses átalakulás. A hőmérséklet csökkenésével (100 K°) a paramágneses fázis atmoszférikus nyomáson is megmarad. A szerzők [27] eredményeiket a sávmodell alapján értelmezik.

Mágneses rend-rend átalakulások is lehetnek elsőrendűek, ennek szép példáját mutatja a Fe—Rh ötvözet. Atmoszférikus nyomáson a közel ekviatomos összetételű ötvözet mágneses tulajdonságait a 13. ábra szemlélteti. Szobahőmérséklet környékén



14. ábra. A $\text{Fe}_{49.5}\text{Rh}_{50.5}$ ötvözet mágneses p — T fázisábrája [34]

az eddig antiferromágneses anyag elsőrendű fázisátalakulással ferromágneses szerkezetbe megy át, majd T_c hőmérsékleten paramágneses lesz. Ezeknek az átalakulásoknak a nyomásfüggését többen is megmérték [29—34]. Nyomás hatására a Curie-pont csökken, az antiferromágneses-ferromágneses átalakulás hőmérséklete (T_k) nő. Kis nyomásokon ($p < 25$ kbar)



15. ábra. A $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{46}\text{Ir}_4$ ötvözet mágneses p — T fázisábrája [32]

$$\frac{\partial T_c}{\partial p} = -1,0 \frac{\text{fok}}{\text{kbar}}, \quad \frac{\partial T_k}{\partial p} = +5,34 \frac{\text{fok}}{\text{kbar}}.$$

Ezekből az eredményekből megbecsülték a p — T állapotábrán jelentkező hármaspontnak megfelelő nyomást, és ez kb. 50 kbar-nak adódott. Nagyobb nyomásokra kiterjesztve a méréseket, azt tapasztalták [32, 34], hogy a görbék lineáritása megszűnik, és a hármaspont 70 kbar felett van. Iridium beötvözésével a kritikus paraméterek csökkennek, a hármaspont a szerzők [32, 33] által elérhető nyomás és hőmérséklettartományba esik és kimutatták a

hármaspont létezését. Érdekes, hogy a mérések arra utalnak, hogy a hármaspont felett az antiferromágneses-paramágneses átalakulás elsőrendű.

2. 3. Magrezonancia kísérletek

Igen hasznos információkat nyújthatnak a nagy nyomáson végzett magrezonancia kísérletek.

Gyengén paramágneses anyagokban a Knight-eltolódás (K) nyomásfüggése elméleti szempontból igen fontos, mert közvetlen információt ad a fém elektronjainak hullámfüggvényeiről: $K \sim \chi_p P_F$, ahol χ_p a paramágneses szuszceptibilitás, míg $P_F = |\psi_F(0)|^2$ annak a valószínűsége, hogy Fermi-energiával rendelkező elektron található a mag helyén. 1958-ban Benedek és Kushida [35] megmérték a Li, Na, Rb, Cu, Al Knight-eltolódását szobahőmérsékleten, 10 kbar nyomásig. Mivel igen kis frekvenciaváltozásokat nagy pontossággal kellett mérni, a mérési követelmények igen szigorúak voltak. Eredményeiket és Bridgman kompresszibilitási adatait felhasználva kiszámították K térfogatfüggését. Megállapították, hogy K változása nem magyarázható csak a hőtágulás hatásával. Az elmélet szerint P_F változásában a rácsrezgéseknek igen nagy szerepük van. A kísérleti eredmények ezt ragyogóan igazolták.

Ferromágneses anyagokban a rendezett d-elektron spinek a mágnesezettséggel arányos nagy belső teret hoznak létre. Ez a belső tér részt vesz a mag helyén mérhető hiperfinom tér kialakításában, ezért a magrezonancia-frekvencia érzékeny a mágneszettség változásaira:

$$\nu(T) = A M(T),$$

ahol az A csatolási állandóhoz a legnagyobb járulékot a hiperfinom kölcsönhatás adja.

1960-ban Robert és Winter [36] vasban mérték a rezonancia-frekvencia nyomásfüggését és az eltért a fenti képletből várható értéktől. Megmérték a rezonancia

frekvencia hőmérsékletfüggését állandó nyomások mellett. *Fallot* korábban [37] mérte a mágnesezettség hőmérsékletfüggését állandó nyomások mellett, és az összehasonlítás azt mutatta, hogy

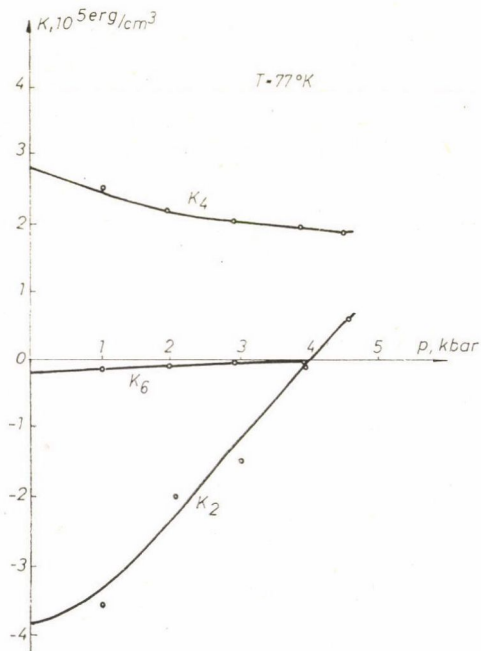
$$\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial T} \bigg|_p < \frac{1}{M} \frac{\partial M}{\partial T} \bigg|_p.$$

Felmerült az a gyanú, hogy a mágneses rezonancia-frekvencia mérése nem ad igaz információt a mágnesezettség hőmérsékletfüggéséről. *Robert* és *Winter* [36] szerint az A együtthatóra hat a hőtágulás. Ha mérik $v(p)$ -t, $M(p)$ -t és a $\partial nV/\partial p$ kompresszibilitást, megkapható $A(V)$, a csatolási állandó térfogatfüggése, amiből megismerhető $\partial \ln A/\partial T|_V$. A méréseket elvégezték [38, 11, 10] és azt találták, hogy $\partial \ln A/\partial T|_V \neq 0$, hanem

$$A = A_0[1 - 0,77 \cdot 10^{-7} T^2].$$

A kérdés az, hogy miért függ az A a hőmérséklettől? *Benedek* [38] elmélete szerint ilyen függés akkor várható, ha az elektronok a d -sáv magasabb állapotaiba kerülnek. Ekkor a d -sáv felső részében és a sáv alsó részében található elektronok más-más járulékot adnak az A -hoz. A hőmérsékletváltozásával ez az eloszlás változik, a Fermi statisztika alkalmazása adja a T^2 függést. Eszerint a d -elektronokat a ferromágneses anyagban úgy lehetne elképzelni, hogy a sávban meghatározott állapotokat foglalnak el. Később *Kushida* [39] nikkelen is megmérte a rezonancia-frekven-

cia nyomásösszefüggését, és ezt összevetve a mágnesezettség-mérésekkel, a nikkelen is a vashoz hasonló szituációt talált.



16. ábra. A Gd anizotrópia állandóinak hőmérsékletfüggése [41]

2. 4. Mágneses anizotrópia

Ferromágneses kristályokban a kicserélődési kölcsönhatáson kívül hat még a mágneses anizotrópia is, aminek következtében a momentumok egyes kristálytani irányokat előnyben részesítenek. Ez az anizotrópia a spin-pálya-kristálytér közti kölcsönhatás miatt jön létre. A nyomás a kristálytér erősségére hat, de szimmetriájára nem, ezért a kristálytér erősségének nyomásfüggése az anizotrópia mechanizmusáról ad felvilágosítást. Az anizotrópia állandók nyomásfüggésének mérésére csak elszórt kísérletek történtek. Így *Kouvel* [40] szobahőmérsékleten mért mágnesezési görbék nyomásfüggéséből határozta meg a vas és Fe-Si ötvözetek anizotróp állandóinak nyomásfüggését. Azt találta, hogy $K_1^{-1} \partial K_1 / \partial p = -5,4 \cdot 10^{-6} / \text{bar}$ vasa, és $-6,7 \cdot$

$\cdot 10^{-6}$ /bar Fe–6% Si ötvözetre. Az elmélet szerint a 0 K° hőmérsékletre normált anizotrópia állandó és a redukált mágnesszettség hőmérsékletfüggése közt a következő összefüggés írható fel:

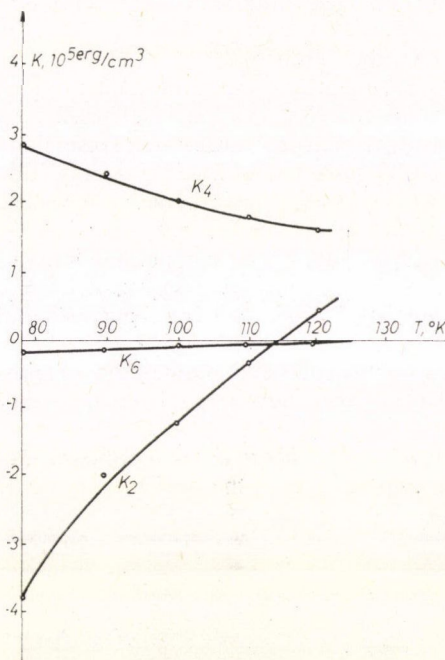
$$\frac{K_1(T)}{K_1(0)} = \left[\frac{\sigma_s(T)}{\sigma_0} \right]^n, \quad n=10.$$

A kísérletek $n=10$ helyett $n \approx 4-6$ értéket adnak. Lehet, hogy az eltérés oka abban rejlik, hogy az elméletet állandó térfogatra dolgozták ki, a mérések pedig állandó nyomáson történtek. Ha K_1 és σ_s a nyomás hatására bekövetkező térfogatváltozás miatt megváltoznak, az maga után vonhatja n változását:

$$n \approx 10 + \frac{V-V_0}{V_0} \frac{\sigma_0 - \sigma_s}{\sigma_0} \frac{1}{\kappa} \cdot \left[\frac{1}{K_1} \frac{\partial K_1}{\partial p} - 10 \frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial p} \right].$$

Ha ezt a változást figyelembe vesszük, vasra $n \approx 8,2$, a Fe-Si ötvözetre $n \approx 9,8$ értéket kapunk, tehát az elmélet és a kísérlet közti eltérés, bár kisebb mértékben, de megmarad. Okát valószínűleg más folyamatokban kell keresni.

Toyama és munkatársai [41] 77 K° hőmérsékleten, ingás magnetométeren közvetlenül mérték a Gd anizotrópia állandóinak nyomásfüggését. Az anizotrópia állandók nyomásfüggése meglepően hasonló a hőmérsékletfüggés görbéjéhez. Ez arra utal, hogy az anizotrópiát befolyásoló tényezők valamelyike tehát a rácsállandó, a spontán mágnesszettség vagy az elektronszerkezet nyomás, illetve hőmérsékletváltozás hatására egyformán reagál. A rácsállandók nyomás és hőmérsékletfüggése túl kicsi és előjelben sem egyeznek; a mágnesszettség növekvő hőmérséklettel, illetve nyomással egyaránt csökken, de $\frac{\partial \sigma_s}{\partial p} \ll \frac{\partial \sigma_s}{\partial T}$. Lehetséges, hogy az anizotrópia állandók változását az elektronállapotokban bekövetkező változások okozzák.



17. ábra. A Gd anizotrópia állandóinak nyomásfüggése [41]

Befejező megjegyzések

E néhány kiragadott példa csak az utóbbi években erőteljes fejlődésnek indult kutatások illusztrálására és nem áttekintésére szolgál. A mágnesség kutatásában különösen nagy szükség van arra, hogy szisztematikus kísérletek sorozatát végezzük el, lehetőleg olyan egyszerű anyagokon, amelyek tulajdonságait alaposan és rész-

letesen meg lehet állapítani. Ezeknek az egyszerű anyagoknak a következő tulajdonságokkal kell rendelkezniök:

a) nagy kompresszibilitás, hogy az elérhető nyomástartományban a rácsállandó-változást széles intervallumban lehessen vizsgálni;

b) lehetőleg szigetelők legyenek, hogy a vezetési elektronok hatását ne kelljen figyelembe venni;

c) mágneses fázisátalakulásuk a szobahőmérséklet közelében legyen, hogy kritikus tulajdonságaikat részletesen vizsgálhassuk;

d) a bennük uralkodó kicserélődési mechanizmus egyszerű típusú legyen, lehetőleg csak a legközelebbi szomszédok kölcsönhatását kelljen figyelembe venni;

e) magrezonancia-képesek legyenek, hogy az elektronok lokalizált momentumai által keltett hiperfinom tér vizsgálata lehetséges legyen.

Ilyen anyagot elég nehéz találni. A ritka földfémekben az indirekt kicserélődési kölcsönhatás viszonylag egyszerű formája az uralkodó, viszont ez több szomszédos atomra terjed ki. Néhány egyszerű antiferromágneses anyag, pl. a MnF_2 sokatígérőnek látszik, de a bennük fellépő „szuperkicserélődés” elméletileg még nem egészen tisztázott. Ferromágneses szigetelők, mint pl. a Gd halogenidjei, vagy néhány ritkaföld-oxid figyelmet érdemel, mert ezek valószínűleg klasszikus Heisenberg-típusú ferromágnesek.

Köszönetet szeretnék mondani Pál Lénárdnak, az MTA levelező tagjának a kézirat gondos átnézéséért és a végleges szöveg kialakításához nyújtott értékes tanácsaiért.

IRODALOM

A nagy nyomások technikájával és fizikájával foglalkozó monográfiák és cikkgyűjtemények

Bridgman P. W.: The Physics of High Pressure. G. Bell and Sons Ltd, London, 1952.

Swenson C. A.: Physics at High Pressure. Solid State Physics, vol. 11. Academic Press, New York, London, 1960.

By Bundy F. P., Hibbard W. R. (Ed.: Progress in Very High Pressure Research, Strong H. M. John Wiley and Sons. Inc. New York—London, 1961.

Kennedy G. C., Newton R. C., Solids under Pressure, Mc Graw Hill Book Co. Inc. New York, 1963.

Paul W., Warshauer D. M.: Solids under Pressure, Mc Graw Hill Book Co. Inc. New York, 1963.

*

[1] Matzkanin G. A., Scott T. A., Phys. Rev. 151, 360, 1966.

[2] Берсенеv Ю. С., Гражданкина Н. П., Олейник М. И., Приборы и техника эксперимента, 5, 157, 1969.

[3] Bridgman P. W., Endeavor, 10, 63, 1951.

[4] Bridgman P. W., Proc. Amer. Acad., 53, 269, 1918.

[5] Bundy F. P., Progress in Very High Pressure Research, John Wiley Inc. New York—London, 1961.

[6] Lynch R. W., J. Chem. Phys., 47, 5180, 1967.

[7] Nagaoka H., Honda K., Phil. Mag., 46, 261, 1898.

[8] Nagaoka H., Honda K., Phil. Mag., 4, 45, 1902.

[9] Ebert H., Kussman A., Physik Z., 38, 437, 1937.

[10] Гальперин Ф., Ларин С., Шишков А., Докл. А. Н. СССР, 89, 419, 1953.

[11] Kouvel J. S., Wilson R. H., J. Appl. Phys. 32, 435, 1961.

[12] Stacey F. D., Can. J. Phys. 34, 304, 1956.

[13] Guggen D., Proc. Phys. Soc. London, 72, 1013, 1958.

[14] Klitzing K. H., Gielessen J., Z. Physik, 146, 59, 1956.

[15] Patrick L., Phys. Rev. 93, 384, 1954.

- [16] Акемоченко А. В., Сошников В. И., Эстрин Э. И., Физика Металлов и Металловедение, 28, 77, 1969.
- [17] Kaneko T., J. Phys. Soc. Japan, 15, 2247, 1960.
- [18] Kondorskij E. I., Sedov V. L., J. Appl. Phys. 31, 331, 1960.
- [19] McWhan D. B., Stevens A. L., Phys. Rev. 139, A682, 1965.
- [20] Milstein F., Robinson L. B., Phys. Rev. 159, 466, 1967.
- [21] Wazzan A. R., Vih R. S., Robinson L. B., Phys. Rev. 159, 400, 1967.
- [22] Bloch D., Pauthenet R., Proc. Int. Conf. on Magn., Nottingham, 1964, p. 255.
- [23] Grazhdankina N. P., Rodionov K. P., Soviet Phys. JETP, 16, 1429, 1963.
- [24] Wayne R. C., Smith F. A., J. Phys. Chem. Solids, 30, 183, 1969.
- [25] Bean C. P., Rodbell D. S., Phys. Rev. 126, 104, 1962.
- [26] Grazhdankina N. P., Colloques Internationaux du Centre National de la Recherche Scientifique, Grenoble, 1969, szeptember.
- [27] Menyuk N., Kafalas J. A., Dwight K., Goodenough J. B., Phys. Rev. 177, 942, 1969.
- [28] Bacon G. E., Street R., Nature, 175, 518, 1955.
- [29] Захаров А. И., Кадомцева А. М., Левитин Р. З., Понятовский Е. Г., ЖЭТФ, 46, 2003, 1964.
- [30] Bloch D., Ann. de Phys. 1, 93, 1966.
- [31] Понятовский Е. Г., Кутсар А. Р., Дубовка Г. Т., Кристаллография, 12, 79, 1967.
- [32] Léger J. M., Susse C., Vodar B., Compt. Rend, 265, 892, 1967.
- [33] Wayne R. C., Phys. Rev., 170, 523, 1968.
- [34] Vinokurova L., Pardavi—Horváth M., Phys. Stat. Sol., 41, K 5, 1970.
- [35] Benedek G., Kushida T., J. Chem. Phys. Solids, 5, 241, 1958.
- [36] Robert C., Winter J. M., Compt. Rend. 250, 3831, 1960.
- [37] Fallot M., Ann. Phys. 6, 1936.
- [38] Benedek G., Armstrong J., J. Appl. Phys. 32, 106S, 1961.
- [39] Solids under Pressure, Chapter 9, ed. Paul W., Warschauer D. M., McGraw Hill, New York, 1963.
- [40] Kouvel J. S., Wilson R. H., J. Appl. Phys. 32, 276, 1961.
- [41] Toyama K., Tajima K., Chikazumi S., Sawaoka A., J. Phys. Soc. Japan, 27, 1070, 1969.
- [42] Jennings L. D., Swenson C. A., Phys. Rev. 112, 31, 1958.
- [43] Bridgman P. W., Endeavor, 10, 63, 1951.

KÖNYVISMERTETÉS

Topics in Theoretical Physics, Dan Olof Riska, Editor. Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1968. Gordon and Breach.

Ez a kötet a Negyedik Finn Elméleti Fizikai Nyári Iskola előadásait foglalja magában. Az Iskolát 1968. július 29-e és augusztus 3-a között rendezték meg, az előzőhöz hasonlóan Liperiben. Ez volt az első eset, hogy az előadások kizárólagosan a nagyenergiájú elméleti fizikára összpontosultak. A kötet tíz előadás anyagát foglalja magában; a közölt szöveget három kivétellel (Faustov, Frautschi, Winternitz) az előadók maguk dolgozták ki.

Chan Hong-Mo (CERN) a nagyenergiájú keltési folyamatok multi-Regge modelljével foglalkozik. A bootstrap leírás képezi M. T. Noga (Helsinki — sztatikus modell és az erős csatolás elmélete), D. Fairlie (Durham — Regge bootstrap), és R. Capps (Purdue University — belső szimmetriák) előadásainak tárgyát. G. Kane (University of Ann Arbor) a nagy energián naggyá váló hatáskeresztmetszeteket tárgyalja. S. Frautschi (Caltech) a Regge-pólusok kicserélődéséhez járuló többszörös szórási korrekciókat elemzi. R. Faustov (Dubna) előadásának témája a diszperziós összegszabályok alkalmazása a részecskefizikában, P. Winternitzé (Dubna) pedig a szórási amplitúdók relativisztikus kifejtése és a Regge-pólus elmélet. Végül két előadás főként kísérleti kérdésekkel foglalkozik. K. E. Lassila és társai (Iowa State University) az A_2 mezon tömegstruktúráját, Y. Goldschmidt—Clermont (CERN) a K^+p kölcsönhatásokat elemzik.

Amint arra a kötet szerkesztője előszavában rámutat, a közölt előadási jegyzetek elkészítése folyamán a formális eleganciánál fontosabbnak tartották a megjelenés gyorsaságát; a szöveget írógéppel írt, a képleteket kézirásos alakban reprodukálták. A kötet kiállítása ebben a formában is izléses, igényes, tartalma pedig — diáknak, kutatónak egyaránt — a legmagasabb szintű tájékoztatást nyújtja a részecskefizikai kutatás első vonalából. A finnek elméleti fizikai iskolája példaként szolgálhat; az iskola anyagát közlő kötetek pedig értékes forrásművek.

Gy. G.

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

A nemzetközi együttműködés előrehaladtával a magyar kutatók fizikai tárgyú dolgozatainak nagy része a legkülönbözőbb külföldi folyóiratokban jelenik meg. A hazai fizikusoknak hovatovább nincs áttekintésük a magyar fizikai kutatások nemzetközi szerepéről. Ezért a Magyar Fizikai Folyóirat szerkesztősége úgy határozott, hogy a lapban új rovatot indít a fenti címmel, s ebben leközli mindazon külföldön megjelent dolgozatok adatait, amelyekről a szerkesztőséget értesítik.

MTA AKUSZTIKAI KUTATÓCSOPORT

- T. Tarnóczy*: Acoustical activities in Hungary, *Electronica y Fisica Aplicada* 11, 128, 1968.
T. Tarnóczy: About a new mechanic-electric effect, *Proc. 6th Intern. Congr. on Acoustics*, Tokyo 1968. H-2-5.
T. Tarnóczy: Communication of Man and Machine, *Prepr. of Speech Symposium*, Kyoto, 1968, D-6-1.
M. Karsai, T. Tarnóczy: Some practical problems of measuring and evaluating of reverberation time. *Archiwum Akustyki*, 3, 109, 1968.
J. Radnai, I. Illényi: The synchronization of a B & K Level Recorder Type 2305 for spatial plotting *Brüel & Kjaer Techn. Review* 4, 17, 1969.
T. Tarnóczy: Masina invata sa vorbesca, *Scienta*, 29 mai 1968, p. 6.
T. Tarnóczy, J. Láng, I. Rózsahegyi: Investigations of the hearing loss caisson-workers. *Rep. III. Conf. sur la Lutte Contre le Bruit*. Bucuresti, 21—24 Mai 1969, 83—93.
T. Tarnóczy: L'acoustique et les vases de Vitruve, *Isolation Revêtements et Architecture Evolutive* No 70 (Sept-Oct. 1969) 15—17.
T. Tarnóczy: Reflexions sur le problème de la reconnaissance automatique de la parole, *Bull. de Group d'Acoust. Musicale*, Paris N 43, Sept. 1969. 1—5.
T. Tarnóczy: Vibration of metal plates covered with vibration damping layers. *J. Sound and Vibr.* 11, 299—307 (1970).
P. Szöke, T. Tarnóczy, M. Filip: Inadequacies of sound spectrography applied in bioacoustics. Attempts for new methods of visual representation. *Reports of XV Internat. Ornithol. Congress*. The Hague, 1970, 210—211.
T. Tarnóczy: Die Sprechchor-Methode, *Acustica* 23, 173, 1970.
T. Tarnóczy: Das durchschnittliche Energie-Spektrum der Sprache (für sechs Sprachen), *Acustica* 24, 57, 1971.

BME FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉK

- I. Gyarmati*: On the Relation Between Onsager's and Prigogine's Principles. *Z. für phys. Chem.* 234, 371, 1967.
Sz. Böröcz: An Example for Gyarmati's Integral Principle of Thermodynamics. *Z. für phys. Chem.* 234, 26, 1967.
J. Verhás: Deduction of Transport Equations from the Integral Principle of Thermodynamics. *Z. für phys. Chem.* 234, 226, 1967.

- I. Gyarmati*: On the Most General Form of the Thermodynamic Integral Principle. *Z. für phys. Chem.* 239, 133, 1968.
- H. Farkas*: The Reformulation of the Gyarmati Principle in a Generalized „ Γ ” Picture. *Z. für phys. Chem.* 239, 124, 1968.
- I. Gyarmati*: On the „Governing Principle of Dissipative Processes” and its Extension to Non-linear Problems. *Annalen der Physik.* 7. Folge Band 23. Heft 7—8. 1969.
- J. Verhás*: Application of the Prigogine—Gyarmati Principle to an Electrochemical Problem. CITCE 16-th Meeting, Budapest, 1956.
- J. Sándor*: The Examination of the Validity of Onsager’s Linear Laws on the Basis of the Measurement of Electromotive Forces of Thermocells. CITCE 16-th Meeting, Budapest 1965.
- И. Дярматы*: Об Общем Вариационном Принципе Неравновесной Термодинамики. *Журн. Физ. Хим.* 39, 6, 1965.
- И. Дярматы*; Я. Шандор: Термодинамика Электрокинетических Явлений. I. Коллоидный Журнал. 28, 3, 1966.
- И. Дярматы*; Я. Шандор: Термодинамика Электрокинетических Явлений. Электрокинетические Явления в Капиллярах. Коллоидный Журнал. 28, 6, 1966.
- Й. Верхауш*: Применение Принципа Пригожина-Дярматы К Термодинамике Необратимых Процессов. *Журн. Физ. Хим.* 40, 6, 1966.

MTA LUMINESZCENCIA ÉS FÉLVEZETŐ TANSZÉKI KUTATÓCSOPORT

- [1] *Ketskemény, I., I. Szalma, L. Kozma, B. Rácz*: Wellenlänge und Energie der Lichtimpulse von Flüssigkeitslasern mit Blitzlampenerregung. *Z. Naturforsch.* 25a, Heft 10, 1512—13, 1970.
- [2] *Ketskemény, I., L. Szalay*: Dal’nejsie isszledovanija otnoszitel’nogo vühoda fluoreszcencii rasztvorov. *Izv. AN SzSzSzR, szer. fiz.* 34, No. 3, 539—542, 1970.
- [3] *Ketskemény, I. L. Kozma*: Zamecsanija o vüpolnenii universal’nogo szootnosenija. *Izv. AN SzSzSzR, szer. fiz.* 34, No. 3., 536—538, 1970.
- [4] *Hevesi J., E. Lehoczki, E. Bálint*: Migracija energii vobuzsdenija v model’nih szisztemah. *Zs. Prikl. Szpektroszk.* 13, No. 3, 458—463, 1970.
- [5] *Hevesi, J., E. Bálint, E. Lehoczki*: Influence of Temperature on the Structure of Dye-Detergent Systems. *Acta Phys. Polon.* A38, Fasc. 6, 829—837, 1970.
- [6] *Singhal, G. S., E. Rabinowitch, J. Hevesi, V. Srinivasan*: Migration of Excitation Energy from Thionine to Methylene Blue in Micelles. *Photochem. Photobiology* 11, No. 6, 531—545, 1970.
- [7] *Gyulai, J., J. W. Mayer, I. V. Mitchell, V. Rodriguez*: Outdiffusion through Silicon Oxide and Silicon Nitride Layers on Gallium Arsenide. *Appl. Phys. Letters* 17, No. 8, 332—334, 1970.
- [8] *Meyer, O., J. Gyulai, J. W. Mayer*: Analysis of Amorphous Layers on Silicon by Backscattering and Channeling Effect Measurements. *Surface Science* 22, No. 2, 263—276, 1970.
- [9] *Gyulai, J., O. Meyer, J. W. Mayer, V. Rodriguez*: Analysis of Silicon Nitride Layers on Silicon by Backscattering and Channeling Effect Measurements. *Appl. Phys. Letters* 16, No. 6, 232—234, 1970.
- [10] *Szöllösy, L., K. Kiss, K. Szanka*: Einfluss der Temperatur auf die spektrale Energieverteilung und das Abklingen einiger lumineszierender Stoffe. *Z. phys. Chem. (Leipzig)* 245, No. 3—4, 275—279, 1970.
- [11] *Karvaly, B., F. Pintér*: Einige Probleme des Modellstoffes in der Diffusreflexions-Spektroskopie. *Silikattechnik* 21, Heft 1, 7—11, 1970.

MTA MŰSZAKI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET

1. *Balázs János—Pődör Bálint*, Transverse magnetoresistance in plastically deformed n-type germanium. *Physica Status Solidi* 37, 119, 1970.
2. *Barna Árpád—Barna Barna Péter—Pócsa Jenő—Pozsgai Imre*. The effect of evaporation arrangement on the morphology and structure of vacuumdeposited thin films. *Thin Solid Films* 5, 201, 1970.
3. *Beleznay Ferenc*, KKR-Z calculation of band structure in elementary semiconductors. *Journal of Physics C: Solid State Physics* 3, 1884, 1970.

4. Ernst Lajos, On the field evaporation of silicon. *Surface Science* 21, 193, 1970.
5. Dornberger—Schiff, K.—Farkasné Jahnke Mária, A direct method for the determination of polytype structures. I. Theoretical basis. *Acta Crystallographica A26*, 24, 1970.
6. Farkasné Jahnke Mária—Dornberger—Schiff, K. A direct method for the determination of polytype structures. II. Determination of a 66R structure. *Acta Crystallographia A26*, p. 35, 1970.
7. Forgács Gábor, A modified method for calibrating the analyser and the polarizer in an ellipsometer. *Journal of Physics D: Applied Physics* 3, 1513, 1970.
8. Gergely György—Hársy Miklós—Schanda, János, Lumineszenzerscheinungen von ZnS-Kristallen gezüchtet aus Gallium-Schmelze. *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 243, 4, 1970.
9. Geszti Tamás, Acoustic paramagnetic relaxation. *Solid State Communications* 8, 901, 1970.
10. Hársy Miklós—Lendvay Ödön, Dislocation etching of GaS. *Journal of Materials Science* 5, 828, 1970.
11. Hársy Miklós—Lendvay Ödön, Heteroepitaxial overgrowth of ZnS on GaS single crystals. *Journal of Materials Science* 5, 988, 1970.
12. Hornyák István, Determination of naphthalene traces by sensitized luminescence on filter paper. *Analytica Chimica Acta* 52, 169, 1970.
13. Lendvay Ödön—Kovács Pál, Hollow single crystals of ZnS. *Journal of Crystal Growth* 7, 61, 1970.
14. Pataki György—Püspöki Sándor, O tokovoj zavisimosti obemno-gradientnoj EDSz v germanii. *Fizika i Tehnika Poluprovodnikov* 4, 1177, 1970.
15. Pfeifer Judit—Gutai László—Szabonné Haraszthy Éva, The structure of epitaxially grown layers and the electrical parameters of p-n junctions formed on them. *Kristall und Technik* 5, 85, 1970.
16. Pócsa Jenő F.—Barna, Árpád—Barna, Barna Péter, Die Ausbildung der Textur von vakuumkondensierten In-Schichten. (*Kristall und Technik* 5 315, 1970).
17. Pődör Bálint, On the dislocation scattering in silicon -on-insulator films. *Physica Status Solidi A/2* K197, 1970.
18. Schanda János—Somogyi Mária—Gál Mihály—Szigeti György, Domain phenomena in ZnS single crystals. *Journal of Luminescence* 1, 2, 51, 1970. *Proceedings of the International Conference on Luminescence Delaware, 1969.*
19. Somogyi Károly, A brief comment on deviation from the Ohm's law in gallium phosphide. *Japanese Journal of Applied Physics* 9 232, 1970.
20. Székely Tamásné—Varga László, X-ray topography of epitaxially grown silicon layers. *Kristall und Technik* 5 K1-4, 1970.
21. Szigeti György—Gál Mihály—Schanda, János, On the investigation of electric field distribution in ZnS crystals by the help of electroabsorption. *Physica Status Solidi A/1* K127, 1970.
22. Uray László, Investigation of solute impurities in powder metallurgical tungsten wires by measuring thermoelectric power and electrical resistivity. *Physica Status Solidi A/3*, 315, 1970.
23. Uray László—Gál István, Resistivity decrease due to grain growth in tungsten. *Physica Status Solidi A/3*, K123, 1970.
24. Varga László—Szentpáli Béla—Bertóti Imre, Detection of mosaic structure in heteroepitaxial systems by microbeam X-ray diffraction. *Physica Status Solidi A/2*, K135, 1970.
25. Bertóti Imre, Heteroepitaxial growth of Si on ZnSiP₂. *Journal of Materials Science* 5, 1073, 1970.
26. Rösner Béla—Mason, I. M., Acoustoelectric domain incubation in semiconducting CdS filaments. *Physics Letters* 32A, 461, 1970.
27. Szabonné Haraszthy Éva—Pfeifer Judit, Eléments de chauffage et sources d'évaporation du germanium utilisable en ultra-vide. *Le Vide* 25, 264, 1970.

KÖNYVISMERTETÉS

Abstract Spaces and Approximation. Proceedings of the Conference held at the Mathematical Research Institute at Oberwolfach, Black Forest, July 18—27, 1968. Edited by P. L. Butzer and B. Sz.-Nagy. Birkhäuser Verlag. 1969.

A konferencia, melynek anyagát ez a kötet magában foglalja, az approximáció elméletéről 1963. augusztus 4. és 10. között Oberwolfachban tartott összejövetelhez kapcsolódott. A hangsúly nem a numerikus vonatkozásokon, hanem az approximáció elméleti kérdésein volt. Különösen fontos helyet kaptak a rokon területek közül a funkcionál-analízis és az operátorelmélet. A konferencián harminckilenc munkát mutattak be; egy további dolgozatot írásban küldöttek be. Mindezeket tartalmazza a jelen kötet. Azonkívül egy összeállítás új és megoldatlan problémákról, valamint a résztvevők utólagos közlései is megtalálhatók benne.

Az előadásokat öt fejezetbe csoportosították. Az Operátorelmélet című I. fejezetből kiemeljük P. R. Halmos előadását az invariáns alterekről, Szőkefalvi-Nagy Béla munkáját a Hilbert-tér C_0 osztályba tartozó operátorairól, I. I. Hirschmann, Jr. és R. G. Douglas dolgozatait a Wiener—Hopf egyenletekről, ill. operátorokról. Az interpoláció és approximáció Banach-terekben c. II. fejezetet G. G. Lorentz és T. Shimogaki előadása vezeti be a A terekre vonatkozó interpolációs tételekről. Tartalmazza a fejezet Alexits György előadását a függvényosztályoknak a legjobb lineáris approximációval való jellemzéséről. A hátralevő fejezetek tárgya: harmonikus analízis és approximáció, numerikus approximáció, algebrai és komplex approximáció, numerikus approximáció és differenciálegyenletek.

A kötetet a szerkesztők Jean Favard emlékének ajánlják, kinek életét és munkásságát Alexits György méltatta előadásában; a méltatásnak a kötetben közölt változatát Alexits és Marc Zamansky jegyezte.

Ennek a nagyértékű matematikai forrásműnek a külső megjelenése méltó a tartalmához; a szó legjobb értelmében világszínvonalat képviselő nyomdai munkákat a Szegedi Nyomda végezte.

Gy. G.

Topics in Theoretical Physics, Christofer Cronström, Editor. Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1967. Gordon and Breach.

A kötet a Harmadik Finn Fizikai Nyári Iskola anyagát adja közre. Az iskola színhelye Liperi volt, Kelet-Finnországban, és 1967. július 27-től augusztus 3-ig tartott. A szervező bizottság Prof. K. V. Laurikainen elnök és Dr. C. Cronström titkár vezetésével végezte munkáját; a szervezésben részt vett a helsinki Egyetem Elméleti Fizikai Kutató Intézete és az Észak-Karéliai Nyári Egyetem (Joensuu).

Az iskolán elhangzott előadások a részecskefizika és a többtestprobléma területére estek. Két előadást — P. G. de Gennes „Self-consistent field calculations; some topics in the theory of long molecules” és D. J. Thouless „Excitation of many-body systems” c. előadását — nem foglal magában a jelen kötet, mivel azok másutt megjelentek. A kötet hat előadást közöl. H. Abarbanel (Princeton) előadása a szórás amplitúdók aszimptotikus viselkedését vizsgálja a Regge-elmélet alapján spinnel rendelkező részecskék ütközései esetében. G. E. Brown (Princeton) „Többtestelmélet” c. előadása a Feynman-gráfok, Green-függvények, kvázirészecskék bevezető tárgyalását adja. M. L. Brown (Northwestern University) előadásainak tárgyát a nagyenergiájú folyamatok kvantum-elektrodinamikája képezi. C. G. Callan (Harvard University) a részecskefizikában alkalmazott áram-algebrai módszerekbe ad bevezetést. R. Roskies (Yale University) a szórás amplitúdók nagy-energiás korlátainak és az impulzusátadásban mutatott analitikus tulajdonságainak fizikai hátterét tárgyalja. A kötetet záró előadásában („Mezondinamika”) P. Singer (Haifa—Helsinki) az áram-algebrával, a részlegesen megmaradó axiálevktor-árammal, a sugárzásos bomlásokkal és az η -mezon fizikájával foglalkozik.

Gy. G.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A FORGÁSCSOPORT ÁBRÁZOLÁSAIRÓL*

V. BARGMANN

Ez a dolgozat új eredményt aligha tartalmaz és érdeklődésre csak módszertani szempontból számíthat. Egy nemrég megjelent munkámban¹ az \mathfrak{F}_n Hilbert-terek egy családját tanulmányoztam, amelyeknek elemei n komplex változó analitikus egész függvényei. Úgy látszik, hogy az említett munkában kidolgozott módszerekkel a forgáscsoport ábrázolásainak elmélete meglehetősen könnyen tárgyalható. Ezt a dolgozatot annak reményében közlöm, hogy talán ösztönzést ad az említett módszerek további alkalmazásához. (Itt és a következőkben a „forgáscsoport” név valójában egy kétdimenziós vektortérre — a kvantummechanika spin-terére — alkalmazható unitér unimoduláris transzformációk \mathcal{U} csoportját jelenti. Ez az a csoport, amely a kvantummechanikai alkalmazások szempontjából alapvető.)

Az, hogy az \mathfrak{F}_n függvényterek alkalmazhatók a forgáscsoport tanulmányozására, azzal a régóta ismert ténnyel kapcsolatos, hogy e csoport irreducibilis ábrázolásait megkaphatjuk oly módon, hogy két komplex változó homogén polinomjait vizsgáljuk. (Mindezek a polinomok az \mathfrak{F}_2 térnek az elemei, s így egyszerre tárgyalhatók.) Ezt a tényt — ilyen vagy olyan alakban — felhasználják a forgáscsoport ábrázoláselméletének csaknem minden tárgyalásában. A legmódszeresebben Kramers és iskolája aknázták ki;² ők a binér invariánsok elméletének fogalmait és módszereit alkalmazták. Van der Waerden ugyancsak igen hathatósan használta fel könyvében,³ például a vektorcsatolási együtthatók levezetésében.

Wigner az egyszerűen reducibilis csoportokról írott mélyenszántó munkájában⁴ megmutatta, hogy a $3-j$ szimbólumok, a $6-j$ szimbólumok stb. és a közöttük fennálló összefüggések figyelemre méltóan sok tulajdonsága nem kizárólag a forgáscsoport sajátja; e tulajdonságokban osztozik minden egyszerűen reducibilis csoport. Ez a dolgozat ezzel szemben a forgáscsoportra korlátozódik. E korlátozás természetesen egyszerűsítéseket és rövidítéseket tesz lehetővé. Azonfelül Regge érdekes felfedezése, amely szerint a $3-j$ és $6-j$ szimbólumok nem sejtett szimmetriákkal

* Reviews of Modern Physics **34**, 829 (1962).

¹ V. Bargmann, Comm. Pure Appl. Math. **14**, 187 (1961). Ezt a dolgozatot a következőkben a (H) megjelöléssel idézzük.

² E módszerekről a következő könyv ad áttekintést: H. C. Brinkmann, *Applications of Spinor Invariants in Atomic Physics* (Interscience Publishers, Inc., New York, 1956).

³ B. L. van der Waerden, *Die gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik* (Verlag Julius Springer, Berlin, 1932).

⁴ E vizsgálatok kitérő kifejtését adja W. T. Sharp, „Racah Algebra and the Contraction of Groups”. CRT-935 (AECL-1098) Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River, Ontario, 1960 (publikálatlan).

rendelkezik,⁵ megtanított arra, hogy vannak fontos összefüggések, amelyek nem érvényesek minden egyszerűen reducibilis csoportra. Habár alábbi elemzésünk nem vezet el a Regge-féle szimmetriák mélyebb megértéséhez, legalábbis lehetővé teszi ezen szimmetriák meglehetősen áttekinthető megfogalmazását és levezetését.

Tíz évvel ezelőtt Schwinger a forgáscsoport rendkívül szellemes tárgyalását közzölte, melynek alapját egy operátor-módszer képezi.⁶ Szigorú matematikai értelemben a jelen dolgozat Hilbert-teres módszere izomorf Schwinger operátor-módszerével. (A részletes összehasonlítást illetően lásd a 2e. szakaszt.) A $3-j$ és $6-j$ szimbólumok generátorfüggvényei speciálisan Schwingertől származnak.

Megközelítésünknek van azonban néhány eltérő jellegzetessége. (1) Schwinger bevezeti az a_{\pm} operátorokat (és azok adjungáltjait), amelyek a bozonterek elnyelő és keltő operátorainak felcserélési összefüggéseit tartoznak kielégíteni. Az összes többi tanulmányozandó objektumot az a_{\pm} operátorok segítségével építi fel, beleértve azon Hilbert-tér ortonormált alaprendszerét képező vektorokat, amelyre az operátorok hatnak. A jelen dolgozatban ezzel szemben a Hilbert-tér *a priori* adott függvénytér, és az analízis szokásos módszereit minden egyes lépésben alkalmazhatjuk. (2) Schwinger elsősorban az impulzusmomentumokkal — a csoportelmélet nyelvén: az infinitezimális elforgatásokkal — foglalkozik, és az ábrázolásokat infinitezimális generátoraikból kiindulva szerkeszti meg. Ebben a dolgozatban viszont az ábrázolásokat közvetlenül definiáljuk az \mathfrak{F} függvénytéren.

Ez a dolgozat az ¹ lábjegyzetben idézett munka ismerete nélkül is olvasható. A (H) dolgozat eredményeit, amilyen mértékig azokra szükségünk van, az 1. szakaszban reprodukáljuk. A 2—4. szakaszok a forgáscsoporttal foglalkoznak. A forgáscsoport ábrázoláselméletét a kezdet kezdetétől tárgyaljuk — az olvasó kényelme és a logikai teljesség érdekében, és azért is, hogy megmutassuk: azok a definíciók és konstrukciók, amelyek az \mathfrak{F} függvénytér keretei között természetesnek látszanak, hasznosak és fontosak a csoportelmélet szempontjából. A direkt szorzat felbontását és a $3-j$ szimbólumokat a 3. szakaszban tárgyaljuk, a $6-j$ szimbólumokat pedig a 4. szakaszban. — Az általánosságot nem korlátozza az a tény, hogy az ábrázolásokat \mathfrak{F} -en szerkesztjük meg, mivel a fő eredmények — például a $3-j$ és a $6-j$ szimbólumok tulajdonságai — csak az ábrázolástól függenek, a vektortértől azonban, amelyen az ábrázolásokat realizáljuk, függetlenek.

Megjegyzések a jelölésről. Néhány kivétellel Wigner könyvének⁷ definícióit és jelölését fogadjuk el. (1) A komplex konjugáltat felülvonással jelöljük ($\bar{\alpha}$ az α komplex konjugáltja). (2) Az A operátor vagy mátrix (hermitikus) adjungáltját A^* jelöli. (3) Az A mátrix transzponáltjának jele tA , az A mátrix determinánsa pedig $\det A$. (4) Az f vektornak és a λ skalárnak a szorzatát tetszésünk szerint mind a λf , mind pedig az $f\lambda$ alakban felírhatjuk, ahogy célszerűbbnek látjuk.

1. Az \mathfrak{F}_n Hilbert-tér

a) *Bevezető megjegyzések.* Az \mathfrak{F}_n Hilbert-tér $f(z)$ elemei analitikus egész függvények, ahol $z = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ a C_n n -dimenziós komplex euklideszi tér pontja.

⁵ T. Regge, Nuovo Cimento **10**, 544 (1958); **11**, 116 (1959).

⁶ J. Schwinger, „On Angular Momentum”, U. S. Atomic Energy Commission, NYO-3071, 1952 (publikálatlan).

⁷ E. P. Wigner, *Group Theory* (Academic Press Inc., New York, 1959).

Minden egész $f(z)$ mindenütt konvergens

$$f(z) = \sum_{h_1, \dots, h_n} \alpha_{h_1 h_2 \dots h_n} z_1^{h_1} z_2^{h_2} \dots z_n^{h_n} \quad (1.1)$$

hatványsorba fejthető. Célszerű lesz a következő rövid jelölések használata. Legyen

$$h = (h_1, \dots, h_n)$$

a h_i nemnegatív egész számok rendezett sorozata, és legyen $h=0$, ha valamennyi $h_i=0$. Az $\alpha_{h_1 \dots h_n}$ együttható helyett egyszerűen α_h -t írunk, és az (1.1) összegben felépítő hatványszorzatokat a

$$z^{[h]} = z_1^{h_1} z_2^{h_2} \dots z_n^{h_n}$$

módon jelöljük. Az (1.1) hatványsor most az

$$f(z) = \sum_h \alpha_h z^{[h]} \quad (1.2)$$

alakban írható fel. Használni fogjuk ezen kívül a

$$|h| = h_1 + h_2 + \dots + h_n, \quad [h!] = h_1! h_2! \dots h_n! \quad (1.3)$$

rövid jelöléseket is.

Az n -dimenziós C_n tér elemeire mint pontokra vagy vektorokra hivatkozunk (a két elnevezést szinonimaként használjuk); $a \cdot b = \sum_{k=1}^n a_k b_k$ az a, b elemek skaláris szorzata. Speciálisan $\bar{a} \cdot a = \sum_k |a_k|^2$.

b) Az \mathfrak{F}_n Hilbert-tér definíciója. Az \mathfrak{F}_n Hilbert-tér f, f' elemeinek belső szorzata

$$(f, f') = \int \overline{f(z)} f'(z) d\mu_n(z), \quad (1.4)$$

ahol

$$d\mu_n(z) = \pi^{-n} \exp(-\bar{z} \cdot z) \prod_k dx_k dy_k \quad (1.4a)$$

$$(z_k = x_k + iy_k).$$

Itt és a következőkben mindenütt az egész C_n térre integrálunk.

Az (1.4) definíció maga után vonja, hogy valamely $f(z)$ egész függvény akkor és csak akkor eleme \mathfrak{F}_n -nek, ha

$$(f, f) = \int |f(z)|^2 d\mu_n(z) < \infty. \quad (1.4b)$$

[Az f függvény normája $\|f\| = (f, f)^{1/2}$.] Leválasztva (1.4a) alatt a Gauss-függvényt, olykor a

$$d\mu_n(z) = \varrho_n(z) d^n z, \quad \varrho_n(z) = \pi^{-n} \exp(-\bar{z} \cdot z), \quad (1.5)$$

$$d^n z = \prod_{k=1}^n dx_k dy_k \quad (1.5a)$$

írásmódot is fogjuk alkalmazni.

Abból a célból, hogy f és f' belső szorzatát kifejezzük hatványsoraik kifejtési együtthatóinak segítségével, először $(z^{[h]}, z^{[h']})$ -t számítjuk ki. Polárkoordinátákat

bevezetve ($z_k = r_k e^{i\varphi_k}$) kapjuk: $(z^{[h]}, z^{[h']}) = \omega_1 \omega_2 \dots \omega_n$, ahol

$$\omega_k = \int_0^{2\pi} \exp(i(h'_k - h_k)\varphi_k) d\varphi_k \int_0^\infty r_k^{h_k + h'_k + 1} e^{-r_k^2} dr_k.$$

Innen következik, hogy $\omega_k = \delta_{h_k h'_k} h_k!$ Eszerint

$$(z^{[h]}, z^{[h']}) = \begin{cases} 0, & h \neq h', \\ [h!], & h = h'. \end{cases} \quad (1.6)$$

Az \mathfrak{H}_n Hilbert-tér $f(z) = \sum \alpha_h z^{[h]}$ és $f'(z) = \sum \alpha'_h z^{[h]}$ elemeinek skaláris szorzatára könnyen kapjuk az

$$(f, f') = \sum_h [h!] \bar{\alpha}_h \alpha'_h \quad (1.7)$$

kifejezést. Speciálisan

$$(f, f) = \sum_h [h!] |\alpha_h|^2. \quad (1.8)$$

Ezt az utóbbi egyenletet a következőképpen értelmezhetjük. Vagy mind a két oldal végtelen — ebben az esetben f nem eleme \mathfrak{H}_n -nek —, vagy mindkettő ugyanazt a véges értéket veszi fel.

Az u_h ortonormált rendszer. Az \mathfrak{H}_n Hilbert-térben a legegyszerűbb ortonormált rendszert (1.6) szerint

$$u_h = z^{[h]} / [h!]^{1/2} \quad (1.9)$$

adja meg; a rendszer teljességét (1.8) fejezi ki.

A \mathfrak{P}_s alterek. Legyen \mathfrak{P}_s az \mathfrak{H}_n Hilbert-tér összes s -edfokú homogén polinomjainak halmaza. Ezt azok az u_h -k feszítik ki, amelyekre $|h| = h_1 + \dots + h_n = s$. \mathfrak{P}_s és $\mathfrak{P}_{s'}$ nyilvánvalóan ortogonálisak, ha $s \neq s'$, és

$$\mathfrak{H}_n = \mathfrak{P}_0 + \mathfrak{P}_1 + \mathfrak{P}_2 + \dots \quad (1.10)$$

az \mathfrak{H}_n Hilbert-tér felbontása páronként ortogonális alterekre. Hasznos bevezetni a

$$\mathfrak{D}_j = \mathfrak{P}_{2j} \quad \left(j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \right) \quad (1.10a)$$

jelölést. Az \mathfrak{H}_n Hilbert-tér f eleme akkor és csak akkor eleme \mathfrak{P}_s -nek, ha

$$f(\lambda z) = \lambda^s f(z) \quad (1.10b)$$

bármely λ állandó mellett, másképpen: akkor és csak akkor, ha a

$$\sum_k z_k (\partial f / \partial z_k) = s \cdot f \quad (1.10c)$$

Euler-egyenlet teljesül.

c) Az \mathbf{e}_a principális vektorok. Legyen a a C_n tér tetszőleges vektora és definiáljuk az \mathbf{e}_a függvényt a következőképpen:

$$\mathbf{e}_a(z) = \exp(\bar{a} \cdot z). \quad (1.11)$$

Világos, hogy e_a eleme \mathfrak{F}_n -nek. Hatványsora:

$$e_a(z) = \sum_h \frac{\bar{a}^{[h]} z^{[h]}}{[h!]} \quad (1.11a)$$

Az (1.7) képletből következik, hogy \mathfrak{F}_n tetszőleges f elemére fennáll:

$$(e_a, f) = \sum_h a^{[h]} \alpha_h = f(a), \quad (1.12)$$

vagy integrál-alakban:

$$\int \exp(a \cdot \bar{z}) f(z) d\mu_n(z) = f(a). \quad (1.12a)$$

Ezen e_a „principális vektorok” létezése az \mathfrak{F}_n tér jellegzetes vonása. Szerepük láthatóan hasonló a $\delta(q-a)$ Dirac-delta szerepéhez a kvantummechanika megszo-
kott Hilbert-terében; azok azonban — a delta-függvényektől eltérően — elemei a Hilbert-térnek.

Az (1.12) képletet $f=e_b$ -re alkalmazva kapjuk:

$$(e_a, e_b) = e_b(a) = \exp(\bar{b} \cdot a); \quad (1.13)$$

eszerint $(e_a, e_a) = \exp(\bar{a} \cdot a)$.

A Schwarz-féle egyenlőtlenség segítségével (1.12) alapján az

$$|f(z)| \leq \|f\| \cdot \|e_z\| \leq \|f\| \exp\left(\frac{1}{2} \bar{z} \cdot z\right) \quad (1.13a)$$

egyenlőtlenség fennállására következtethetünk. Megfordítva, ha az $f(z)$ egész függ-
vény kielégíti az

$$|f(z)| \leq c \exp\left(\frac{1}{2} \gamma \bar{z} \cdot z\right)$$

egyenlőtlenséget, ahol c és γ pozitív állandók és $\gamma < 1$, úgy az (1.4b) definíció értel-
mében f eleme \mathfrak{F}_n -nek. (A $\gamma < 1$ állandót nem szabad elfelednünk!)

d) Az \mathfrak{F}_n Hilbert-tér felbontása szorzat alakjában. Az n szám minden egyes,
két egész számra való $n = n' + n''$ felbontásának megfelel \mathfrak{F}_n egy-egy felbontása az

$$\mathfrak{F}_n = \mathfrak{F}_{n'} \otimes \mathfrak{F}_{n''} \quad (1.14)$$

direkt szorzat alakjában. Legyen $z' = (z_1, \dots, z_{n'})$ és $z'' = (z_{n'+1}, \dots, z_n)$. Ha $f'(z')$
és $f''(z'')$ az $\mathfrak{F}_{n'}$, ill. az $\mathfrak{F}_{n''}$ tér eleme, akkor szorzatunk, $f(z) = f'(z') f''(z'')$, az \mathfrak{F}_n
térhez tartozik. Azonfelül (1.4a) folytán $d\mu_n(z) = d\mu_{n'}(z') d\mu_{n''}(z'')$ és f -nek $g(z) =$
 $= g'(z') g''(z'')$ -vel való belső szorzatára kapjuk:

$$(f, g) = (f', g')(f'', g'');$$

itt az (f', g') és az (f'', g'') szorzatot az $\mathfrak{F}_{n'}$, ill. az $\mathfrak{F}_{n''}$ téren kell képeznünk. Ennek
megfelelően felbonthatók az u_h ortonormált függvények, valamint az e_a principális
vektorok is.

Hasonlóképpen képezhetők $\mathfrak{F}_{n'}$ és $\mathfrak{F}_{n''}$ altereinek szorzatai is, pl.

$$\mathfrak{P}_{s' s''} = \mathfrak{P}_{s'} \otimes \mathfrak{P}_{s''}, \quad \mathfrak{Q}_{j' j''} = \mathfrak{Q}_{j'} \otimes \mathfrak{Q}_{j''} \quad (1.14a)$$

[lásd (1.10) és (1.10a)]; ezek valamennyi, z' -ben homogén, s' -edfokú, továbbá z'' -ben homogén, s'' -edfokú polinomot magukban foglalják. Azokat az f függvényeket, amelyek $\mathfrak{P}_{s's''}$ elemei,

$$f(\lambda' z', \lambda'' z'') = \lambda'^{s'} \lambda''^{s''} f(z' z'')$$

jellemzi, ahol λ' és λ'' tetszőleges komplex állandó.

e) *Operátorok az \mathfrak{F}_n téren.* Tekintsünk át röviden néhány operátort, amelyek előfordulnak a következőkben.

(α) *$A z_k, d_k$ operátorok.* Itt d_k a $\partial/\partial z_k$ differenciál-operátor. Minthogy az \mathfrak{F}_n tér f elemei analitikusak, $z_k f$ és $d_k f$ mint analitikus függvények mindenkor értelmezve vannak, de nem szükségképpen tartoznak hozzá \mathfrak{F}_n -hez. Mi a z_k és d_k operátorokat csak polinomokra fogjuk alkalmazni, úgyhogy nem merül fel semmilyen nehézség.

A d_k, z_k operátorok nyilvánvalóan eleget tesznek a

$$[z_k, z_l] = 0, \quad [d_k, d_l] = 0, \quad [d_k, z_l] = \delta_{kl} \quad (1.15)$$

felcserélési összefüggéseknek; z_k és d_k azonfelül adjungáltak [az (1.4) belső szorzatra nézve]:

$$z_k = d_k^*, \quad (1.15a)$$

azaz \mathfrak{F}_n bármely két f, g elemére fennáll

$$(z_k f, g) = (f, d_k g), \quad (1.16)$$

hacsak $z_k f$ és $d_k f$ hozzátartozik \mathfrak{F}_n -hez. Az egyszerűség kedvéért legyen $k=1$. Továbbá, ha $h = (h_1, h_2, \dots, h_n)$, h' jelentése legyen $h' = (1 + h_1, h_2, \dots, h_n)$. Az $f = \sum \alpha_h z^{[h]}$ és $g = \sum \beta_h z^{[h]}$ hatványsor-előállításokat felhasználva kapjuk:

$$z_1 f = \sum \alpha_h z^{[h']}, \quad d_1 g = \sum (1 + h_1) \beta_h z^{[h]},$$

$$(z_1 f, g) = \sum_h [h'] \bar{\alpha}_h \beta_{h'},$$

$$(f, d_1 g) = \sum_h (1 + h_1) [h] \bar{\alpha}_h \beta_{h'};$$

minthogy $(1 + h_1)[h] = [h']$, ezzel igazoltuk (1.16)-ot.

Az (1.15), (1.15a) egyenletekből következik, hogy a d_k, z_k operátorok kielégítik a bozonterek elnyelő és keltő operátorainak felcserélési összefüggéseit.⁸

(β) *$A T_U$ unitér transzformációk.* A C_n térre ható bármely U unitér transzformációhoz definiálható egy T_U operátor az \mathfrak{F}_n téren a következőképpen:⁹

$$(T_U f)(z) = f(Uz) \quad (1.17)$$

ahol U az U mátrix transzponáltja. T_U nyilvánvalóan lineáris operátor (azaz: lineáris f -ben), és ha U és U' két unitér transzformációt jelöl, úgy

$$T_U T_{U'} = T_{UU'}. \quad (1.17a)$$

Ha $U=1$, úgy T az azonos transzformáció ($=1$), úgyhogy $T_{U^{-1}} = T_U^{-1}$.

⁸ I. E. Segal az \mathfrak{F}_n tér \mathfrak{F}_∞ általánosítását használta fel a kvantumtérelmélet kanonikus operátorainak széles körű tanulmányozására; ekkor végtelen sok d_k, z_k operátor lép fel. (Lectures at the Summer Seminar on Applied Mathematics, 1960, Boulder, Colorado, publikálatlan.)

⁹ Ez némileg különbözik (H) megfelelő definíciójától (lásd ¹); (3.4) egyenlet, 205. old.

Azonfelül T_U unitér operátor. Bevezetve az (1.4) integrálba a $z' = {}^t U z$ új változókat azt találjuk, hogy

$$(T_U f, T_U g) = (f, g) \quad (1.18)$$

a $d\mu_n(z)$ mérték ugyanis invariáns a z vektor unitér transzformációival szemben.

Innen következik, hogy a T_U operátorok az n -dimenziós unitér csoportnak — és bármely alcsoportjának is — unitér ábrázolását létesítik. Nyilvánvaló, hogy a \mathfrak{P}_s alterek mindegyike önmagába transzformálódik [erről meggyőződhetünk pl. az (1.10b) kritérium segítségével]; ez az ábrázolás tehát felbomlik. Az $n=2$ esetben ez képezi az alapját a forgáscsoport alább következő tárgyalásának.

(γ) A K konjugálás. Az utolsó operátor, amelyet megvizsgálunk, a konjugálás K operátora, amelyet a következőképpen definiálunk. Legyen $g = Kf$; itt

$$g(z) = \overline{f(\bar{z})}, \quad (1.19)$$

ahol a felülvonás, mint korábban is, a komplex konjugált jele. Ha $f = \sum \alpha_h z^{[h]}$, úgy eredményül

$$g(z) = \sum \bar{\alpha}_h z^{[h]}, \quad (1.19a)$$

azaz a komplex konjugált koefficienseket tartalmazó hatványsor adódik.

Megjegyezzük, hogy K a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

(1) K antilineáris, azaz

$$K(f_1 + f_2) = Kf_1 + Kf_2, \quad K(\lambda f) = \bar{\lambda} Kf,$$

ahol λ tetszőleges komplex állandó;

$$(2) \quad K^2 = 1;$$

$$(3) \quad (Kf, Kf') = (f', f) = (\bar{f}, \bar{f}'),$$

azaz K antiunitér. (3) fennállítására a belső szorzatnak mind az (1.4), mind az (1.6) definíciója alapján következtethetünk.

Ha $Kf = f$ (azaz f hatványsorának együtthatói valósak), az f függvényt nevezhetjük valósnak. Eszerint $z^{[h]}$ és u_h valós.

A K operátor segítségével definiálhatjuk az \mathfrak{F}_n téren értelmezett A lineáris operátor komplex konjugáltját:

$$\bar{A} = KAK. \quad (1.20)$$

\bar{A} ugyancsak lineáris, minthogy K kétszer szerepel az (1.20) definícióban. Ha $B = \bar{A}$, úgy $\bar{B} = A$. Legyen

$$Au_h = \sum_{h'} u_{h'} a_{h'h},$$

ahol $a_{h'h}$ az A operátor mátrixelemeit jelöli az u_h rendszerben. Ekkor $Ku_h = u_h$ tekintetbevételével kapjuk:

$$\bar{A}u_h = K(Au_h) = \sum_{h'} u_{h'} \overline{a_{h'h}}. \quad (1.21)$$

Eszerint az \bar{A} operátor mátrixelemei A mátrixelemeinek komplex konjugáltjai.

A T_U operátor komplex konjugáltja. Ha \bar{U} az U mátrix komplex konjugáltja, úgy

$$\overline{T_U} = T_U.$$

Bizonyítás. Legyen $g = \overline{T_U f}$, továbbá legyen $f_1 = Kf$, $f_2 = T_U f_1$, $g = Kf_2$. A definíció szerint $g(z) = \overline{f_2(\bar{z})}$, $f_2(\bar{z}) = f_1({}^t U \bar{z}) = f_1(y)$, és végül $f_1(y) = \overline{f(\bar{y})} = \overline{f({}^t U z)}$. Így tehát $g(z) = \overline{f({}^t U z)}$, Q. E. D.

2. A \mathcal{D}^j ábrázolások

a) Az \mathfrak{U} csoport. Kiindulásképpen röviden áttekintjük a kétdimenziós unimoduláris unitér transzformációk \mathfrak{U} csoportját s annak kapcsolatát a forgáscsoporttal.

A C_2 tér vektorait ζ -val jelöljük, komponenseit pedig ζ_1 -gyel és ζ_2 -vel. (Ha több ζ vektorral lesz dolgunk, komponenseiket ζ_1, ζ_2 helyett ξ -vel és η -val fogjuk jelölni, hogy ne lépjen fel túl sok index.) A ζ, ζ' vektorok (hermitikus) belső szorzata

$$\bar{\zeta} \cdot \zeta' = \bar{\zeta}_1 \zeta'_1 + \bar{\zeta}_2 \zeta'_2.$$

Az hermitikus Pauli-féle spinmátrixokat jelölje

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

írjuk továbbá:

$$b_1 \sigma_1 + b_2 \sigma_2 + b_3 \sigma_3 = \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3);$$

itt \mathbf{b} valós vagy komplex komponensekkel rendelkező hármasektor. Bármely kétsoros, kétszlopos B mátrix felírható a

$$B = b_0 \cdot \mathbf{1} + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.1a)$$

alakban; itt b_0 és \mathbf{b} egyértelműen meg van határozva.

A spinmátrixok algebrai tulajdonságai az

$$\begin{aligned} (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= 2(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{1}, \\ (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= 2i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (2.2)$$

alakban foglalhatók össze, ahol \mathbf{a}, \mathbf{b} tetszőleges vektorok, $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ pedig ezek vektorszorzata.

A következőkben a

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

mátrix fontos szerepet fog játszani. (Ez a spinorkalkulusban alapvető ε mátrix.) Megjegyezzük, hogy

$${}^t \Gamma = -\Gamma, \quad \Gamma^2 = -1, \quad {}^t \Gamma \cdot \Gamma = 1, \quad \det \Gamma = 1. \quad (2.3a)$$

Minden kétsoros, kétszlopos B mátrixhoz definiálható a B_a asszociált mátrix a

$$B_a = \Gamma B \Gamma^{-1} \quad (2.4)$$

képlet segítségével.

$$\text{Ha } B = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \text{ úgy } B_a = \begin{pmatrix} \delta & -\gamma \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

(A B_a mátrix elemei B aldeterminánsai.) Fennáll:

$$({}^t B)_a = {}^t(B_a), \quad (B^{-1})_a = (B_a)^{-1}, \quad (BC)_a = B_a \cdot C_a, \quad (2.4a)$$

$$B \cdot {}^t B_a = {}^t B \cdot B_a = (\det B) \cdot \mathbf{1}. \quad (2.4b)$$

Mint hogy a spinmátrixokra $\sigma_k^2 = 1$, $\det \sigma_k = -1$ teljesül, (2.4b) segítségével kapjuk:

$$({}^t \sigma_k)_a = -\sigma_k. \quad (2.4c)$$

Eszerint bármely, a (2.1a) alakban felírt B -re

$$B \cdot {}^t B_a = (b_0 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})(b_0 - \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (b_0^2 - b^2) \cdot \mathbf{1}, \quad (2.4d)$$

$$\det B = b_0^2 - b^2, \quad b^2 = \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}.$$

Az \mathfrak{U} csoport. Az U mátrix akkor és csak akkor eleme \mathfrak{U} -nak, ha ${}^t U \cdot \bar{U} = 1$ és $\det U = 1$. Tekintettel a (2.4b) összefüggésekre, ezeket a feltételeket a következőkkel helyettesíthetjük:

$$U_a = \Gamma U \Gamma^{-1} = \bar{U}; \quad \det U = 1. \quad (2.5)$$

Legyen $U = b_0 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} \in \mathfrak{U}$. Ekkor $U^* = \bar{b}_0 + \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = U^{-1}$; (2.4d) szerint $U^{-1} = b_0 - \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Innen következik, hogy b_0 valós, \mathbf{b} pedig képzetes. Legyen $b_0 = a_0$ és $\mathbf{b} = -i\mathbf{a}$; azt találjuk, hogy U akkor és csak akkor tartozik \mathfrak{U} -hoz, ha

$$U = a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \det U = a_0^2 + \mathbf{a}^2 = 1 \quad (2.6)$$

(a_0 , \mathbf{a} valós). Mátrix-alakban:

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 - ia_3 & -ia_1 - a_2 \\ -ia_1 + a_2 & a_0 + ia_3 \end{pmatrix},$$

$$\delta = \bar{\alpha}, \quad \gamma = -\bar{\beta}, \quad \alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} = 1. \quad (2.6a)$$

A kapcsolat a forgáscsoporttal. Az \mathfrak{U} csoport minden egyes U eleme egy-egy $\mathbf{r}' = R_U \mathbf{r}$ elforgatást definiál:

$$\mathbf{r}' \cdot \boldsymbol{\sigma} = U(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})U^{-1}, \quad (2.7)$$

úgyhogy $R_{U_1} R_{U_2} = R_{U_1 U_2}$ és $R_{-U} = R_U$. A (2.2) képleteket felhasználva könnyű számítással kapjuk:

$$\mathbf{r}' = R_U \mathbf{r} = (a_0^2 - \mathbf{a}^2)\mathbf{r} + 2(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r})\mathbf{a} + 2a_0(\mathbf{a} \times \mathbf{r}); \quad (2.7a)$$

ez az elforgatás jól ismert előállítása Euler-féle *homogén paraméterek* segítségével; írható:

$$a_0 = \cos\left(\frac{1}{2}\varphi\right), \quad \mathbf{a} = \sin\left(\frac{1}{2}\varphi\right)\mathbf{n}, \quad (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1), \quad (2.7b)$$

ahol \mathbf{n} az R_U elforgatás tengelye, φ pedig a szöge.

Az \mathbf{n} tengely körül végrehajtott elforgatások egyparaméteres alcsoportjának az \mathfrak{U} csoport

$$U(\varphi) = \cos\left(\frac{1}{2}\varphi\right) - i \sin\left(\frac{1}{2}\varphi\right)\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \exp\left[-\frac{1}{2}i\varphi(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})\right]$$

alcsoportja felel meg.

b) $A \mathcal{D}^j$ ábrázolások. Most már könnyen megkaphatunk néhány, az \mathfrak{U} csoport \mathcal{D}^j ábrázolásaira vonatkozó alapvető eredményt.

Az $f(\zeta)$ analitikus függvények \mathfrak{F}_2 terén (most z helyett ζ -t írunk) a T_U operátorok az \mathfrak{U} csoport unitér ábrázolását létesítik:

$$(T_U f)(\zeta) = f(U\zeta); \quad (2.8)$$

ezt az 1e. szakaszban megmutattuk.

A $2j$ -edrendű homogén polinomok $\mathfrak{Q}_j = \mathfrak{P}_{2j}$ altere — ahol $2j=0, 1, 2, \dots$ — invariáns a T_U transzformációkkal szemben; \mathcal{D}^j az \mathfrak{U} csoport azon ábrázolása, amelyet T_U -nak a \mathfrak{Q}_j altérre való korlátozása definiál. Minthogy a \mathfrak{Q}_j alterek különböző dimenziójúak, a különböző \mathcal{D}^j ábrázolások nyilvánvalóan inekvivalensek.

Az első szakasz szerint [lásd az (1.9) egyenletet] \mathfrak{Q}_j -t a

$$\zeta_1^\lambda \zeta_2^\lambda / (\lambda! \lambda!)^{1/2} = \xi^\lambda \eta^\lambda / (\lambda! \lambda!)^{1/2} \quad (\lambda + \lambda = 2j) \quad (2.9)$$

$2j+1$ ortonormált függvény feszíti ki, másképpen

$$v_m^j = \xi^{j+m} \eta^{j-m} / [(j+m)!(j-m)!]^{1/2} \quad (\lambda - \lambda = 2m). \quad (2.9a)$$

Ha U -t (2.6a) adja meg, úgy

$$T_U v_m^j = \frac{(\alpha \xi + \gamma \eta)^{j+m} (\beta \xi + \delta \eta)^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}. \quad (2.10)$$

A $\mathcal{D}_m^{jm'}(U)$ mátrixelemeket

$$T_U v_m^j = \sum_{m'} v_{m'}^j \mathcal{D}_m^{jm'}(U), \quad \mathcal{D}_m^{jm'}(U) = (v_{m'}^j, T_U v_m^j) \quad (2.10a)$$

definiálja és explicit alakjukat a (2.10) egyenletből vezethetjük le.

A z -tengely körül végrehajtott elforgatások esetén $U(\varphi) = \cos(\frac{1}{2}\varphi) - i \sin(\frac{1}{2}\varphi)\sigma_3$, úgyhogy (2.6a) alatt $\alpha = e^{-i\varphi/2}$, $\delta = e^{i\varphi/2}$, $\beta = \gamma = 0$, és

$$T_U v_m^j = e^{-im\varphi} v_m^j. \quad (2.10b)$$

c) *Infinitezimális transzformációk.* Vegyük szemügyre a (2.7c) egyparaméteres csoportot, és a megfelelő $T_{U(\varphi)}$ transzformációkat. A $T_{U(\varphi)}$ transzformáció infinitezimális generátorát az

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{M})f = i(d/d\varphi)T_{U(\varphi)}f|_{\varphi=0} \quad (2.11)$$

képlet segítségével definiálhatjuk. A (2.8) egyenlet alapján az

$$((\mathbf{n} \cdot \mathbf{M})f)(\zeta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \zeta_\alpha (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta} \frac{\partial f(\zeta)}{\partial \zeta_\beta} \quad (2.11a)$$

kifejezést kapjuk, ahol $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta}$ az $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ mátrix elemeit jelenti. Eszerint

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{M} = n_1 M_1 + n_2 M_2 + n_3 M_3,$$

$$M_k = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \zeta_\alpha (\sigma_k)_{\alpha\beta} d_\beta, \quad d_\beta = \partial/\partial \zeta_\beta. \quad (2.12)$$

Az M_k operátorok az egyes \mathfrak{Q}_j altereket önmagukba transzformálják. [Ha az f függvény $2j$ -edrendű homogén polinom, úgy (2.11a) folytán $M_k f$ szintén az.] Azonfelül

önadjungáltak. Erre abból a tényből következtethetünk, hogy $-i(\mathbf{n} \cdot \mathbf{M})$ infinitezimális unitér operátor, vagy pedig (2.12) explicit kifejezése alapján, minthogy σ_k hermitikus mátrix és (1.15a) folytán $(\zeta_\alpha d_\beta)^* = \zeta_\beta d_\alpha$.

Az $\mathbf{n} \cdot \mathbf{M}$ és $\mathbf{n}' \cdot \mathbf{M}$ operátorok *kommutátorát* könnyen kiszámíthatjuk:

$$[\mathbf{n} \cdot \mathbf{M}, \mathbf{n}' \cdot \mathbf{M}] = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta} \zeta_\alpha [\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}]_{\alpha\beta} d_\beta = \frac{i}{2} \sum \zeta_\alpha ((\mathbf{n} \times \mathbf{n}') \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta} d_\beta = i(\mathbf{n} \times \mathbf{n}') \cdot \mathbf{M};$$

itt felhasználtuk a (2.2) összefüggéseket. Eszerint

$$[M_1, M_2] = iM_3, \quad [M_2, M_3] = iM_1, \quad [M_3, M_1] = iM_2. \quad (2.12a)$$

A (2.12) egyenlet alapján írható:

$$M_1 + iM_2 = \zeta_1 d_2, \quad M_1 - iM_2 = \zeta_2 d_1, \quad (2.13)$$

$$M_3 = \frac{1}{2} (\zeta_1 d_1 - \zeta_2 d_2),$$

úgyhogy pl.

$$M_3 v_m^j = m v_m^j,$$

összhangban (2.10b)-vel.

Végezetül

$$\begin{aligned} M^2 &= \sum_{k=1}^3 M_k^2 = M_3^2 + M_3 + (M_1 - iM_2)(M_1 + iM_2) = \\ &= \frac{1}{4} (\zeta_1 d_1 + \zeta_2 d_2)^2 + \frac{1}{2} (\zeta_1 d_1 + \zeta_2 d_2) = N(N+1), \end{aligned}$$

ahol

$$N = \frac{1}{2} (\zeta_1 d_1 + \zeta_2 d_2).$$

A \mathfrak{P}_{2j} téren $Nf = jf$ [lásd az (1.10c) egyenletet], így tehát $M^2 f = j(j+1)f$.

Megjegyzés. Két kérdést eddig nem vizsgáltunk; ezek: a fent megszerkesztett ábrázolások (1) *irreducibilitása* és (2) *teljessége*. (1) Ahhoz, hogy a \mathcal{D}^j ábrázolások irreducibilitását bebizonyítsuk, elegendő megmutatnunk, hogy minden, a \mathfrak{D}_j téren értelmezett T_U lineáris operátor, amely valamennyi operátorral kommutál, szükségképpen az $A = \alpha \cdot 1$ alakú. Ha A kommutál valamennyi T_U -val, ugyancsak kommutál az M_k operátorok mindegyikével [(2.11) folytán], és a (2.13) képletek segítségével elvégzett egyszerű számítás azt mutatja, hogy ebből valóban $A = \alpha \cdot 1$ következik. (2) A teljesség sokkal mélyebb probléma; kétséges, hogy az eddig megadott, integrális (Wigner⁷, 166. old.) vagy differenciális (Waerden³, 17. szakasz) módszereken alapuló bizonyításokat lehet-e lényegesen egyszerűsíteni. Minden esetre a dolgozat speciális módszere, úgy látszik, nem ad semmi újat ehhez a problémához.

d) *Áttérés a komplex konjugáltra.* Az első szakasz végén láttuk, hogy $T_U = \bar{T}_U$. Minthogy az áttérés \bar{T}_U -ra a v_m^j függvények rendszerében maga után vonja az áttérést a komplex konjugált mátrixelemekre, kapjuk:

$$\mathcal{D}^j(\bar{U}) = \overline{\mathcal{D}^j(U)}. \quad (2.14)$$

A \mathcal{D}^j mátrixok unitér voltából következik, hogy

$$\mathcal{D}^j(U^*) = \mathcal{D}^j(U^{-1}) = (\mathcal{D}^j(U))^{-1} = (\mathcal{D}^j(U))^*$$

és így

$$\mathcal{D}^j({}^tU) = \overline{\mathcal{D}^j(U^*)} = \overline{(\mathcal{D}^j(U))^*} = {}^t\mathcal{D}^j(U). \quad (2.14a)$$

A (2.3) alatt bevezetett Γ mátrix eleme az \mathfrak{U} csoportnak. A $\Gamma U \Gamma^{-1} = \bar{U}$ összefüggés tehát maga után vonja $\bar{T}_U = T_\Gamma T_U T_{\Gamma^{-1}}$ teljesülését; speciálisan fennáll:¹⁰

¹⁰ A $\mathfrak{Q}_{1/2}$ téren $\mathcal{D}^{1/2}(U) = U$ és $C^{1/2} = \Gamma$.

$$\overline{\mathcal{D}^j(U)} = C^j \mathcal{D}^j(U) (C^j)^{-1}; \quad C^j = \mathcal{D}^j(\Gamma). \quad (2.15)$$

A ${}^t\Gamma = -\Gamma = \Gamma^{-1}$, $\Gamma^2 = -1$ összefüggésekből következik, hogy

$${}^tC^j = (-1)^{2j} C^j = (C^j)^{-1}, \quad (C^j)^2 = (-1)^{2j}, \quad (2.15a)$$

mivel $\mathcal{D}^j(-1) = (-1)^{2j}$.

Bevezetve a

$$w_m^j = T_\Gamma^{-1} v_m^j \quad (2.16)$$

függvényeket, új ortonormált rendszert kapunk, amelyre fennáll

$$T_U w_m^j = \sum_{m'} w_{m'}^j \overline{\mathcal{D}_m^{jm'}(U)}. \quad (2.16a)$$

Valóban,

$$T_U w_m^j = T_U T_\Gamma^{-1} v_m^j = T_\Gamma^{-1} \bar{T}_U v_m^j = T_\Gamma^{-1} \left(\sum_{m'} v_{m'}^j \overline{\mathcal{D}_m^{jm'}(U)} \right) = \sum_{m'} w_{m'}^j \overline{\mathcal{D}_m^{jm'}(U)}.$$

Legyen $T_{\Gamma^{-1}} f = g$, ahol $f(\zeta)$ tetszőleges függvény. Ekkor $g(\zeta) = f({}^t\Gamma^{-1}\zeta) = f(\Gamma\zeta)$, azaz

$$g(\zeta_1, \zeta_2) = f(-\zeta_2, \zeta_1). \quad (2.16b)$$

Eszerint

$$w_m^j = (-1)^{j+m} v_{-m}^j. \quad (2.16c)$$

Fennáll

$$\begin{aligned} w_m^j &= \sum_{m'} v_{m'}^j (C^j)_{m'm}^{-1} = \sum_{m'} C_{mm'}^j v_{m'}^j, \\ v_m^j &= \sum_{m'} w_{m'}^j C_{m'm}^j \end{aligned} \quad (2.16d)$$

(itt felhasználtuk a ${}^tC^j = (C^j)^{-1}$ relációt); így tehát

$$C_{mm'}^j = (-1)^{j+m} \delta_{m, -m'} = (-1)^{j-m'} \delta_{m, -m'}. \quad (2.16e)$$

e) *Összehasonlítás Schwinger módszerével.* Schwinger kiindulásképpen bevezeti a mi d_z, ζ_z operátorainknak megfelelő a operátorokat:

$$a_+ \rightarrow d_1, \quad a_- \rightarrow d_2, \quad a_+^\dagger \rightarrow \zeta_1, \quad a_-^\dagger \rightarrow \zeta_2. \quad (2.17)$$

Ezekre az operátorokra vonatkozóan posztulálja az (1.15) felcserélési összefüggéseket, valamint az (1.15a) adjungáltságot. Ezek után az a operátorok segítségével definiálja a I_k operátorokat, amelyek a mi (2.12) alatt megadott M_k operátorainknak felelnek meg, valamint az ortonormált vektor-rendszert, mely kifeszíti a Hilbert-teret,

amelyre az a operátorok hatnak. Az „alapállapot” vektora ψ_0 ; ez itt $v_0^0 = 1$ -nek felel meg, minthogy $a_+\psi_0 = a_-\psi_0 = 0$ (vagy $\partial\psi_0/\partial\zeta_1 = \partial\psi_0/\partial\zeta_2 = 0$). A $\psi(jm)$ vektort

$$\psi(jm) = \frac{(a_+^j)^{j+m}(a_-^j)^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \psi_0$$

definiálja; ez (2.17) értelmében a

$$v_m^j = \frac{\zeta_1^{j+m}\zeta_2^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \cdot 1$$

vektornak felel meg. Azonfelül az a operátorok pontosan úgy hatnak a ψ_{jm} vektorokra, mint a megfelelő d_α, ζ_α operátorok a v_m^j vektorokra, amivel a két módszer *izomorfáját* igazoltuk. Azt mondhatjuk, hogy az \mathfrak{F} függvénytér, a d_α, ζ_α operátorokkal, Schwinger absztraktabb módon definiált rendszerének realizációját képezi.

3. A direkt szorzat felbontása és a 3-j szimbólumok

A kvantummechanikai vektor-összeadási modell keretei között a $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ direkt szorzat felbontása ad választ arra a kérdésre, hogy a $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2$ impulzusmomentumok összeadása milyen $\mathbf{j}' = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$ eredőt eredményez. A részletes választ a vektor-összeadási együtthatók foglalják magukban. Legyen $\mathbf{j}_3 = -\mathbf{j}'$; ekkor a kérdést úgy is feltehetjük, hogy mely feltételek mellett áll fenn $\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = 0$. Ez utóbbi probléma vezet el a Wigner-féle 3-j szimbólumokhoz, amelyeknek nagyobb fokú szimmetriáját ezen megfogalmazás (\mathbf{j}_1 -ben, \mathbf{j}_2 -ben és \mathbf{j}_3 -ban) szimmetrikusabb volta okozza.

a) *Előzetes megjegyzések az ábrázoláselméletről.* Idézzük fel a következő tényeket. Legyen V_α a \mathfrak{B} unitér vektortéren definiált unitér operátorok egy családja, legyen továbbá e_1, e_2, \dots, e_m és f_1, f_2, \dots, f_n a vektorok két sorozata \mathfrak{B} -ben, amelyek V_α hatása alatt a következőképpen transzformálódnak:

$$V_\alpha e_i = \sum_{j=1}^m e_j q_{ji}(\alpha); \quad V_\alpha f_r = \sum_{s=1}^n f_s \sigma_{sr}(\alpha). \quad (3.1)$$

(Az $m=n, f_i=e_i$ esetet nem zárjuk ki!) Feltesszük, hogy a $q_{ji}(\alpha)$ és $\sigma_{sr}(\alpha)$ mátrixok *unitérek és irreducibilisek*.

Vegyük szemügyre a $\beta_{ir} = (e_i, f_r)$ belső szorzatokat. Tekintetbe véve V_α unitér voltát, a (3.1) egyenletből kapjuk:

$$\beta_{ir} = (V_\alpha e_i, V_\alpha f_r) = \sum_{j,s} \overline{q_{ji}(\alpha)} \beta_{js} \sigma_{sr}(\alpha).$$

Mátrix-alakban: $\beta = q^*(\alpha) \beta \sigma(\alpha)$, s minthogy q unitér,

$$q(\alpha) \beta = \beta \sigma(\alpha).$$

A Schur-lemma alapján az alábbi következtetésekre jutunk:

$$(1) \text{ Ha } q \text{ és } \sigma \text{ inekvivalens, úgy } \beta = 0, \quad (3.2)$$

azaz $(e_i, f_r) = 0$, i, r minden értékére.

(2) Ha $\varrho = \sigma$ (s ennél fogva $m = n$), úgy $(e_i, f_r) = \beta_{ir} = \lambda \delta_{ir}$. Ez érvényes speciálisan az $f_i = e_i$ esetben, úgyhogy

$$(e_i, e_j) = \lambda \delta_{ij}; \quad \|e_1\|^2 = \|e_2\|^2 = \dots = \|e_n\|^2 = \lambda. \quad (3.2a)$$

b) A $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ szorzatábrázolás. $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ direkt szorzatok alábbi tárgyalása \mathfrak{F}_n -nek az 1d) szakaszban ismertetett felbontásán (pontosabban \mathfrak{F}_4 felbontásán) alapszik. Legyen $\zeta' = (\xi_1, \eta_1)$, $\zeta'' = (\xi_2, \eta_2)$; \mathfrak{F}_2 és \mathfrak{F}_2'' pedig jelölje az $f(\zeta')$, ill. $f(\zeta'')$ analitikus függvények Hilbert-terét. Ekkor $\mathfrak{F}_4 = \mathfrak{F}_2 \otimes \mathfrak{F}_2''$ az $f(\zeta', \zeta'')$ vagy $f(z)$ analitikus függvények tere, ahol $z = (z_1, z_2, z_3, z_4) = (\xi_1, \eta_1, \xi_2, \eta_2)$.

Az \mathfrak{U} csoport tetszőleges U elemére a T'_U és a T''_U operátort az \mathfrak{F}_2 , ill. \mathfrak{F}_2'' téren a (2.8) egyenlet definiálja. Az \mathfrak{F}_4 tér $f(\zeta', \zeta'')$ függvénye esetében ennek megfelelően írható:

$$(T_U^{(2)} f)(\zeta', \zeta'') = f(U\zeta', U\zeta''). \quad (3.3)$$

Amint azt az 1e. szakaszban megmutattuk, a $T_U^{(2)}$ operátorok \mathfrak{U} unitér ábrázolását képezik; azonfelül

$$T_U^{(2)} = T'_U \oplus T''_U,$$

mivel ha $f(\zeta', \zeta'') = f_1(\zeta') f_2(\zeta'')$, úgy

$$T_U^{(2)} f = (T'_U f_1)(T''_U f_2).$$

A (3.3) egyenletből következik, hogy a $T_U^{(2)}$ -nak megfelelő infinitezimális transzformációk:

$$M_k^{(2)} = M'_k + M''_k \quad (k = 1, 2, 3), \quad (3.3b)$$

ahol M'_k és M''_k a (2.12) mintára képezhetők; ζ helyére majd ζ' -t, majd ζ'' -t kell írunk. Az M'_k operátorok mindegyike kommutál az M''_l operátorok mindegyikével.

Az \mathfrak{F}_4 tér $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2} = \mathfrak{Q}'_{j_1} \otimes \mathfrak{Q}''_{j_2}$ alterét (lásd (1.14)) a következő $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ számú ortonormált függvény feszíti ki:

$$v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta'') = \frac{\xi_1^{j_1+m_1} \eta_1^{j_1-m_1} \xi_2^{j_2+m_2} \eta_2^{j_2-m_2}}{[(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!]^{1/2}} = \frac{\xi_1^{\kappa_1} \xi_2^{\kappa_2} \eta_1^{\lambda_1} \eta_2^{\lambda_2}}{[\kappa_1! \kappa_2! \lambda_1! \lambda_2!]^{1/2}}, \quad (3.4)$$

$$\kappa_\alpha + \lambda_\alpha = 2j_\alpha, \quad \kappa_\alpha - \lambda_\alpha = 2m_\alpha \quad (\alpha = 1, 2). \quad (3.4a)$$

A $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ alter invariáns $T_U^{(2)}$ -val szemben; $T_U^{(2)}$, ha a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ alterre korlátozódunk, a $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ szorzatábrázolást szolgáltatja.

Nyilvánvaló, hogy mindez miképpen általánosítható kettőnél több tér szorzata esetére. Ilyenre példa az $f(\zeta', \zeta'', \zeta''')$ analitikus függvények $\mathfrak{F}_6 = \mathfrak{F}_2 \otimes \mathfrak{F}_2 \otimes \mathfrak{F}_2''$ Hilbert-tere. A $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3} = \mathfrak{Q}'_{j_1} \otimes \mathfrak{Q}'_{j_2} \otimes \mathfrak{Q}'''_{j_3} = \mathfrak{Q}_{j_1 j_2} \otimes \mathfrak{Q}'''_{j_3}$ alteret a

$$v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta'') v_{m_3}^{j_3}(\zeta''') = \frac{\xi_1^{\kappa_1} \xi_2^{\kappa_2} \xi_3^{\kappa_3} \eta_1^{\lambda_1} \eta_2^{\lambda_2} \eta_3^{\lambda_3}}{[\kappa_1! \kappa_2! \kappa_3! \lambda_1! \lambda_2! \lambda_3!]^{1/2}} = \frac{\xi^{[\kappa]} \eta^{[\lambda]}}{[\kappa!]([\lambda!]^{1/2}} \quad (3.5)$$

függvények feszítik ki, ahol $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, $\eta = (\eta_1, \eta_2, \eta_3)$, $\kappa = (\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3)$, $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ és

$$\kappa_\alpha + \lambda_\alpha = 2j_\alpha, \quad \kappa_\alpha - \lambda_\alpha = 2m_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (3.5a)$$

Legyen

$$(T_U^{(3)} f)(\zeta', \zeta'', \zeta''') = f({}'U\zeta', {}'U\zeta'', {}'U\zeta'''), \quad (3.6)$$

fennáll:

$$T_U^{(3)} = T_U^{(2)} \otimes T_U''' = T_U' \otimes T_U'' \otimes T_U'''. \quad (3.6a)$$

Az infinitezimális transzformációk: $M_k^{(3)} = M_k' + M_k'' + M_k'''$; ha a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3}$ invariáns altérre szorítkozunk, a $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} \otimes \mathcal{D}^{j_3}$ ábrázolást kapjuk.

c) A $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ szorzatábrázolás felbontása. Tegyük fel, hogy $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ tartalmazza a \mathcal{D}^{j_3} ábrázolást, azaz van $2j_3 + 1$ olyan ortonormált $\psi_m^{j_3}$ függvény $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ -ben, hogy

$$T_U^{(2)} \psi_m^{j_3} = \sum_{\mu=-j_3}^{j_3} \psi_\mu^{j_3} \mathcal{D}_m^{j_3 \mu}(U), \quad m = j_3, j_3 - 1, \dots, -j_3 \quad (3.7)$$

teljesül. Vegyük szemügyre az

$$a = \sum_m \psi_m^{j_3} w_m^{j_3}(\zeta''')$$

függvényt a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3}$ térben, ahol $w_m^{j_3}(\zeta''') = \sum_{\mu} C_{m\mu}^{j_3} v_\mu^{j_3}(\zeta''')$ [lásd a (2.16d) egyenletet].

Az a függvény, minthogy ortonormált függvények összege, $\neq 0$. A

$$T_U''' w_m^{j_3} = \sum_v w_v^{j_3} \overline{\mathcal{D}_m^{j_3 v}}(U)$$

egyenlet felhasználásával kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} T_U^{(3)} a &= \sum_m (T_U^{(2)} \psi_m^{j_3}) (T_U''' w_m^{j_3}) = \\ &= \sum_{m, \mu, \nu} \psi_\mu^{j_3} w_\nu^{j_3} \mathcal{D}_m^{j_3 \mu}(U) \overline{\mathcal{D}_m^{j_3 \nu}}(U) = \sum_{\mu, \nu} \psi_\mu^{j_3} w_\nu^{j_3} \delta_{\mu\nu} = a. \end{aligned} \quad (3.7a)$$

Eszerint a invariáns $T_U^{(3)}$ -val szemben, és $M_k^{(3)} a = (M_k' + M_k'' + M_k''') a = 0$ (ezze¹ egyenértékű megállapítás, hogy $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} \otimes \mathcal{D}^{j_3}$ tartalmazza az azonos ábrázolást). Ez a precíz matematikai tartalma az ezen szakasz kezdetén tett megjegyzéseknek.

Megfordítva, legyen h egységnyi normájú függvény a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3}$ térben, amelyre fennáll

$$T_U^{(3)} h = h. \quad (3.8)$$

Minthogy a $w_m^{j_3}(\zeta''')$ függvények kifesztik a \mathfrak{Q}_{j_3}''' teret, h kifejezhető a

$$h = \sum_m \chi_m w_m^{j_3} \quad (3.8a)$$

alakban, ahol χ_m a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ tér egyértelműen meghatározott eleme. A (3.7a) egyenlet felhasználásával írható:

$$T_U^{(3)} h = \sum_m (T_U^{(2)} \chi_m) (T_U''' w_m^{j_3}) = \sum_m \left\{ \sum_{m'} (T_U^{(2)} \chi_{m'}) \overline{D_{m'}^{j_3 m}}(U) \right\} w_m^{j_3}.$$

Mint hogy $T_U^{(3)}h = h$, kapjuk:

$$\sum_{m'} (T_U^{(2)} \chi_{m'}) \overline{\mathcal{D}_m^{j_3 m}(U)} = \chi_m,$$

és így

$$T_U^{(2)} \chi_m = \sum_{\mu} \chi_{\mu} \mathcal{D}_m^{j_3 \mu}(U).$$

A (3.2a) egyenlet szerint $(\chi_m, \chi_{m'}) = \lambda \delta_{mm'}$. Eszerint h ortogonális függvényeknek az összege, és minthogy a feltevés szerint normált, $\|h\|^2 = \sum_m \|\chi_m\|^2 = (2j_3 + 1)\lambda = 1$. Így tehát

$$\psi_m^{j_3} = (2j_3 + 1)^{1/2} \chi_m \quad (3.8b)$$

a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ térben ortonormált függvényrendszert képez, mely \mathcal{D}^{j_3} szerint transzformálódik.

d) Az F_k , H_k függvények és a $3-j$ szimbólumok. A $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3}$ térbeli h invariáns függvény [lásd (3.8)] a következőképpen szerkeszthető meg.¹¹ Minthogy az U mátrixok unimodulárisak, a következő három determináns:

$$\delta_1 = \xi_2 \eta_3 - \xi_3 \eta_2, \quad \delta_2 = \xi_3 \eta_1 - \xi_1 \eta_3, \quad \delta_3 = \xi_1 \eta_2 - \xi_2 \eta_1, \quad (3.9)$$

invariáns $T_U^{(3)}$ -val szemben. Ugyanez igaz a δ_x mennyiségek minden

$$F_k = \frac{\delta_1^{k_1} \delta_2^{k_2} \delta_3^{k_3}}{k_1! k_2! k_3!} = \frac{\delta^{[k]}}{[k!]} \quad k = (k_1, k_2, k_3) \quad (3.9a)$$

monomjára, ahol k_x tetszőleges nemnegatív egész számot jelöl; a faktoriálisokat a célszerűség okából írtuk be a nevezőbe. [Szükség esetén fel fogjuk tüntetni a változókat, melyektől F_k függ, $F_k(\xi, \eta)$ -t vagy $F_k(\xi', \xi'', \xi''')$ -t írva.] Az F_k függvény akkor és csak akkor eleme a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2 j_3}$ térnek, azaz: akkor és csak akkor $2j_1$ -ed, $2j_2$ -ed és $2j_3$ -adfokú homogén függvénye a ξ' , ξ'' , ill. ξ''' változóknak, ha

$$k_2 + k_3 = 2j_1, \quad k_3 + k_1 = 2j_2, \quad k_1 + k_2 = 2j_3, \quad (3.10)$$

vagy ami ezzel egyenértékű,

$$k_x = I - 2j_x \quad (\alpha = 1, 2, 3); \quad I = j_1 + j_2 + j_3; \quad (3.10a)$$

$$k_1 = j_2 + j_3 - j_1, \quad k_2 = j_3 + j_1 - j_2, \quad (3.10b)$$

$$k_3 = j_1 + j_2 - j_3.$$

Megjegyezzük, hogy

$$k_1 + k_2 + k_3 = I. \quad (3.10c)$$

Amint az alábbiakban megmutatjuk [lásd (3.24)], $\|F_k\|^2 = (I+1)!/[k!]$. A megfelelő normált h ennél fogva

$$H_k = \Delta(j_1, j_2, j_3) F_k; \quad \Delta(j_1, j_2, j_3) = ([k!]/(I+1)!)^{1/2}, \quad (3.11)$$

ahol Δ az ún. „kvantummechanikai háromszög-koefficiens”.

¹¹ Itt B. L. van der Waerden levezetését követjük (³ láb., 69. old.).

Minden H_k -nak megfelel a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ térben $2j_3 + 1$ ortonormált $\psi_m^{j_3}$ függvény [lásd (3.8b)], amelyek \mathcal{D}^{j_3} szerint transzformálódnak, hacsak $j_3 = j_1 + j_2 - k_3$, ahol $k_3 \equiv 0$ egész, és $j_3 \equiv |j_1 - j_2|$, amint az (3.10b)-ből következik. Minthogy a j_3 különböző értékeinek megfelelő ψ függvények egymásra *ortogonálisak* (3.2) folytán, ily módon összesen $n = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ ortonormált függvényt kapunk a $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ térben. Minthogy $\mathfrak{Q}_{j_1 j_2}$ dimenziója n , ezzel a $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ felbontást elvégeztük.

A $3-j$ szimbólumok. A H_k függvényt kifejezhetjük a (3.5) szorzatok szerint:

$$H_k = \sum_{m_1, m_2, m_3} \begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix} v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta'') v_{m_3}^{j_3}(\zeta'''); \quad (3.12)$$

a kifejtési együtthatók a $3-j$ szimbólumok.¹²

A $T_U^{(3)} H_k = H_k$ invariancia-reláció ekvivalens a

$$\sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \mathcal{D}_{\mu_1}^{j_1 m_1}(U) \mathcal{D}_{\mu_2}^{j_2 m_2}(U) \mathcal{D}_{\mu_3}^{j_3 m_3}(U) \begin{pmatrix} \mu_1 \mu_2 \mu_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix}$$

egyenletekkel. A $v_{\mu}^{j_3} = \sum_{m_3} w_{m_3}^{j_3} C_{m_3 \mu}^{j_3}$ összefüggéseket felhasználva kapjuk:

$$H_k = \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} m_1 m_2 j_3 \\ j_1 j_2 m_3 \end{pmatrix} v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta'') w_{m_3}^{j_3}(\zeta'''), \quad (3.13)$$

$$\begin{pmatrix} m_1 m_2 j_3 \\ j_1 j_2 m_3 \end{pmatrix} = \sum_{\mu} C_{m_3 \mu}^{j_3} \begin{pmatrix} m_1 m_2 \mu \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_3 + m_3} \begin{pmatrix} m_1 m_2 - m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix}. \quad (3.13a)$$

Így tehát (3.8a) és (3.8b) folytán

$$\psi_{m_3}^{j_3} = (2j_3 + 1)^{1/2} \sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} m_1 m_2 j_3 \\ j_1 j_2 m_3 \end{pmatrix} v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta''). \quad (3.14)$$

Ez utóbbi egyenlet megadja a vektor-csatolási ($V-Cs$) együtthatók, valamint a $3-j$ szimbólumok kapcsolatát. [A $V-Cs$ együtthatók standard alakjukban a (3.14) alatt fellépő együtthatóktól a $(-1)^{k_1}$ tényezőben különböznek; lásd Wigner¹², (24.16) egyenlet, 294. old.]

Tekintettel a későbbiekre, itt néhány megjegyzést teszünk. (1) Ha (3.12) vagy (3.13) alatt H_k -t F_k -val helyettesítjük, az együtthatókat $\Delta(j_1, j_2, j_3)$ -mal kell osztanunk; írhatjuk:

$$\begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix}_F = \left(\frac{(I+1)!}{[k!]} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix}. \quad (3.15a)$$

¹² Az m indexek helyzete a (3.12) egyenletben megfelel a kovariáns és kontravariáns indexek Wigner-féle általános definíciójának (lásd ⁷, 292–296. old.). Minthogy azonban a teljesen kontravariáns és a teljesen kovariáns $3-j$ szimbólumok számszerűen egyenlők [lásd ⁷, (24.18a), 295. old.], a (3.12) alatt fellépő együtthatók megegyeznek azon ismertebb $3-j$ szimbólumokkal, amelyekben j és m fordított helyzetű. A \mathcal{D}^j mátrixelemeket is Wigner szabályaival összhangban írtuk fel; azonban — szintén Wignert követve — a $v_{m, m}^j$ stb. jelölést használjuk, tekintet nélkül ezen mennyiségek transzformációs tulajdonságaira.

Hasonló megállapítást tehetünk a (3.13a) alatt fellépő $3-j$ szimbólumra vonatkozóan. (2) A (2.16), (2.16b) képletek értelmében $w_m^j(\zeta) = v_m^j(\Gamma\zeta)$. Következésképpen ha a (3.13) képlet alapján H_k -nak a $\zeta', \zeta'', \Gamma^{-1}\zeta'''$ helyen felvett értékét képezzük, a jobb oldalon $w_{m_3}^{j_3}(\Gamma^{-1}\zeta''') = v_{m_3}^{j_3}(\zeta''')$ jelenik meg. Ha ζ'' -re hasonló transzformációt alkalmazunk, kapjuk:

$$F_k(\zeta', \Gamma^{-1}\zeta'', \Gamma^{-1}\zeta''') = \sum_{m_1, m_2, m_3} \begin{pmatrix} m_1 j_2 j_3 \\ j_1 m_2 m_3 \end{pmatrix}_F v_{m_1}^{j_1}(\zeta') v_{m_2}^{j_2}(\zeta'') v_{m_3}^{j_3}(\zeta'''), \quad (3.15b)$$

$$\begin{pmatrix} m_1 j_2 j_3 \\ j_1 m_2 m_3 \end{pmatrix}_F = (-1)^{j_2+m_2+j_3+m_3} \begin{pmatrix} m_1-m_2-m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix}_F. \quad (3.15c)$$

e) A $3-j$ szimbólumok kiszámítása. Vezessük be az f és a h együtthatók rendszerét — melyek egymással szorosan összefüggnek — az

$$F_k(\xi, \eta) = \sum_{\kappa, \lambda} f_{k \times \lambda} \xi^{[\kappa]} \eta^{[\lambda]}, \quad (3.16a)$$

$$H_k(\xi, \eta) = \sum h_{k \times \lambda} \frac{\xi^{[\kappa]} \eta^{[\lambda]}}{([\kappa!][\lambda!])^{1/2}}, \quad (3.16b)$$

$$h_{k \times \lambda} = \left(\frac{\prod_{\alpha=1}^3 k_{\alpha}! \kappa_{\alpha}! \lambda_{\alpha}!}{(I+1)!} \right)^{1/2} f_{k \times \lambda} \quad (3.16c)$$

egyenletek segítségével.

Tekintetbe véve a (3.5) egyenletet, (3.12) és (3.16b) összehasonlítása alapján kapjuk:

$$\begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix} = h_{k \times \lambda}, \quad (3.17)$$

$$k_{\alpha} = I - 2j_{\alpha}, \quad \kappa_{\alpha} = j_{\alpha} + m_{\alpha}$$

$$\lambda_{\alpha} = j_{\alpha} - m_{\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (3.17a)$$

Úgy vélhetnénk, hogy felesleges kilenc k , κ , λ egész számot bevezetni. Mindamellet ezek alkalmasabbak arra, hogy segítségükkel a $3-j$ szimbólumok szimmetriáját maradéktalanul kifejezzük, mint a megszokott j -k és m -ek. (Hasonló a helyzet a $6-j$ szimbólumok esetében, amint a következő szakaszban meglátjuk.)

A (3.15) egyenletek az f és h együtthatókat k , κ , λ valamennyi értékére definiálják, minthogy azonban [(3.9) folytán] F_k a ξ_{α} , valamint az η_{α} változóknak $k_1 + k_2 + k_3$ -adfokú homogén függvénye, f és h eltűnik, hacsak

$$\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = k_1 + k_2 + k_3 = I \quad (3.18)$$

nem teljesül. Ez a feltétel az $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ egyenletnek felel meg.

Az $f_{k \times \lambda}$ együtthatók kiszámítása céljából egyszerűen a binomiális tételt alkal-

mazzuk δ_x hatványaira. Írjuk:

$$\frac{\delta_1^{k_1}}{k_1!} = \sum_{p_1+q_1=k_1} \frac{(\xi_2 \eta_3)^{p_1} (-\xi_3 \eta_2)^{q_1}}{p_1! q_1!},$$

$$\frac{\delta_2^{k_2}}{k_2!} = \sum_{p_2+q_2=k_2} \frac{(\xi_3 \eta_1)^{p_2} (-\xi_1 \eta_3)^{q_2}}{p_2! q_2!},$$

$$\frac{\delta_3^{k_3}}{k_3!} = \sum_{p_3+q_3=k_3} \frac{(\xi_1 \eta_2)^{p_3} (-\xi_2 \eta_1)^{q_3}}{p_3! q_3!}.$$

Az eredmény

$$f_{k\lambda} = \sum \frac{(-1)^{q_1+q_2+q_3}}{p_1! p_2! p_3! q_1! q_2! q_3!}. \quad (3.19)$$

Az összegezés mindazon nemnegatív egész p_x, q_x értékekre terjesztendő ki, amelyek elég tesznek a következő mátrixegyenletben összefoglalt feltételeknek:

$$L \equiv \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1+p_1 & q_2+p_2 & q_3+p_3 \\ q_2+p_3 & q_3+p_1 & q_1+p_2 \\ q_3+p_2 & q_1+p_3 & q_2+p_1 \end{pmatrix} \equiv Q. \quad (3.19a)$$

A (3.19) kifejezés egyszerű összeg, minthogy valamennyi p_x, q_x kifejezhető egyikük (bármelyikük) segítségével. Legyen $q_3 = z$. Ekkor $p_1 = \kappa_2 - z$, $p_2 = \lambda_1 - z$, $p_3 = k_3 - z$; $q_1 = k_1 - \kappa_2 + z$, $q_2 = k_2 - \lambda_1 + z$, s az összeg azokra a z értékekre terjed ki, amelyek mellett valamennyi p és q nemnegatív. (Ez Racah kifejezése.¹³) Ha μ jelöli L elemeinek legkisebbikét, az összeg tagjainak száma $\mu + 1$.

Az L mátrix egyes soraiban, valamint egyes oszlopaiban álló elemek összege L -vel egyenlő [lásd (3.17a) és (3.18)]. A Q mátrix valamennyi sor- és oszlopösszege *per definitionem* egyenlő; közös értékük $\sum_{\alpha=1}^3 (p_\alpha + q_\alpha)$.

Végül írhatunk $f_{k\lambda}$ helyett f_L -et; hasonlóképpen használhatjuk a h_L jelölést is. Az L mátrix elemeit $l_{i\alpha}$ -val jelölve (ahol i a sort és α az oszlopot jelöli), (3.16) és (3.17) az

$$\begin{pmatrix} m_1 m_2 m_3 \\ j_1 j_2 j_3 \end{pmatrix} = h_L = \left(\frac{\prod l_{i\alpha}}{(I+1)!} \right)^{1/2} f_L \quad (3.19b)$$

alakban foglalható össze.

f) $A \Phi$ generátorfüggvény és a 3-j szimbólum szimmetriái. A 3-j szimbólumok generátorfüggvényét a

$$\Phi(\tau, \xi, \eta) = \sum_k \tau^{[k]} F_k(\xi, \eta) = \sum_{k, \kappa, \lambda} f_{k\kappa\lambda} \tau^{[k]} \xi^{[\kappa]} \eta^{[\lambda]} = \sum_L f_L \tau^{[k]} \xi^{[\kappa]} \eta^{[\lambda]} \quad (3.20a)$$

képlet definiálja¹⁴, ahol $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ egy komplex változó-hármas. A τ, ξ, η

¹³ G. Racah, Phys. Rev. **62**, 438 (1942), (16) egyenlet. Lásd még A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1957), (3.6.11) egyenlet.

¹⁴ Ez megfelel a Schwinger által definiált függvénynek [lásd ⁶, (3.42)].

változókat célszerű a

$$\Xi = \begin{pmatrix} \tau_1 & \tau_2 & \tau_3 \\ \xi_1 & \xi_2 & \xi_3 \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 \end{pmatrix}$$

mátrix-alakban elrendezni, L mintájára. A (3.9) képletből azonnal következik, hogy

$$\Phi(\tau, \xi, \eta) \equiv \Phi(\Xi) = \exp\left(\sum_{\alpha=1}^3 \tau_\alpha \delta_\alpha\right) = \exp(D(\tau, \xi, \eta)) = \exp(\det \Xi), \quad (3.21)$$

$$D(\tau, \xi, \eta) = \det \Xi = \begin{vmatrix} \tau_1 & \tau_2 & \tau_3 \\ \xi_1 & \xi_2 & \xi_3 \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 \end{vmatrix}. \quad (3.21a)$$

A D determináns elemi szimmetriáinak megfelelnek az f és h együtthatók bizonyos szimmetriái.¹⁵ A következő tényekre hivatkozunk:

(α) Legyen A valamely 3×3 -as mátrix, és $P(A)$ jelölje azt a mátrixot, amelyet A elemeinek valamely adott permutációja segítségével kapunk (pl. két sor vagy két oszlop transzpozíciója útján stb.). Ekkor¹⁶

$$\Phi(P(\Xi)) = \sum f_{P(L)} \tau^{[k]} \xi^{[x]} \eta^{[z]}.$$

(β) Legyen $\exp[-D(\tau, \xi, \eta)] = \Phi'(\tau, \xi, \eta) \equiv \Phi'(\Xi)$. Nyilvánvalóan fennáll:

$$\Phi'(\Xi) = \Phi(-\tau, \xi, \eta) = \sum (-1)^I f_L \tau^{[k]} \xi^{[x]} \eta^{[z]},$$

minthogy $k_1 + k_2 + k_3 = I$.

Az együtthatókat összehasonlítva a következő megállapításokat tehetjük:

- (a) Ha $\det[P(\Xi)] = \det \Xi$, akkor $\Phi(P(\Xi)) = \Phi(\Xi)$ és így $f_{P(L)} = f_L$.
 - (b) Ha $\det[P(\Xi)] = -\det \Xi$, akkor $\Phi(P(\Xi)) = \Phi'(\Xi)$ és így $f_{P(L)} = (-1)^I f_L$.
- Ily módon a következő végeredményre jutunk:

Első eset: Ha $P(1)$ a sorok páros permutációja, (2) az oszlopok páros permutációja, (3) a sorok felcserélése az oszlopokkal, akkor

$$f_{P(L)} = f_L \quad \text{és} \quad h_{P(L)} = h_L. \quad (3.22)_I$$

Második eset: Ha $P(1)$ a sorok páratlan permutációja, (2) az oszlopok páratlan permutációja, akkor

$$f_{P(L)} = (-1)^I f_L \quad \text{és} \quad h_{P(L)} = (-1)^I h_L. \quad (3.22)_{II}$$

[Az f együtthatókra vonatkozó egyenletek, amelyek a fenti megfontolásokból köz-

¹⁵ Ez a bizonyítás lényegében azonos a Regge által megadottal [lásd az ⁵ alatt idézett első cikket].

¹⁶ Vegyük szemügyre n számú x_r változó valamely

$$G(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \gamma_{i_1 i_2 \dots i_n} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_n^{i_n}$$

hatványsorát, és legyen $G'(x_1, x_2, \dots, x_n) \equiv G(x_{\pi_1}, x_{\pi_2}, \dots, x_{\pi_n})$, ahol $(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n)$ az $1, 2, \dots, n$ egész számok valamely permutációja. Ekkor $G'(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \gamma_{\pi_1 \pi_2 \dots \pi_n} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_n^{i_n}$.

A mi esetünkben a τ, ξ, η változók felelnek meg az x_r -eknek és f_L a $\gamma_{i_1 i_2 \dots i_n}$ együtthatóknak.

vetlenül következnek, maguk után vonják a h együtthatókra vonatkozó egyenleteket. A (3.19b) egyenletben fellépő normálási állandónak ugyanis sem a számlálóját, sem a nevezőjét nem érintik a (3.22) alatt fellépő P operációk.]

Az I és II alatt felsorolt operációk generálják a Regge által felfedezett 72 elemű szimmetriacsoportot. Ezt megelőzően csak a következő, nyilvánvalóbb szimmetriaoperációk voltak ismertek: (1) Az L mátrix *oszlopainak* permutációi, azaz a j_α -k és az m_α -k szimultán permutációi. (2) Az L mátrix második és harmadik sorának transzpozíciója, azaz valamennyi m_α előjelének megváltoztatása.

g) F_k normája. Amint az (1.13b)-ből következik, τ rögzített értékére a $\Phi_\tau \equiv \Phi(\tau, \xi, \eta)$ generátorfüggvény eleme az \mathfrak{F}_6 térnek, hacsak a τ_α -k elég kicsinyek. (A feltétel pontos alakjával, ami $\sum_{\alpha=1}^3 |\tau_\alpha|^2 < 1$, most nem kell törődnünk.) Két ilyen függvénynek, Φ_τ -nak és $\Phi_{\tau'}$ -nek, az \mathfrak{F}_6 téren képezett belső szorzata (3.20a) folytán

$$(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'}) = \sum_{k, k'} \bar{\tau}^{[k]} \tau'^{[k']} (F_k, F_{k'}). \quad (3.23)$$

A belső szorzatot (1.4) mintájára képezve, a ξ és az η integrációt szétválaszthatjuk:

$$(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'}) = \int \left[\int \exp D(\tau, \xi, \eta) \exp D(\tau', \xi, \eta) d\mu_3(\eta) \right] d\mu_3(\xi). \quad (3.23a)$$

A közönséges vektorszámítás jelölésével $D(\tau, \xi, \eta) = (\tau \times \xi) \cdot \eta$. A belső integrál eszerint az (1.13) alakú (ha η -t azonosítjuk z -vel); most

$$a = \tau \times \xi, \quad b = \tau' \times \xi.$$

Az integrál értéke $\exp(\bar{b} \cdot a)$, ahol

$$\bar{b} \cdot a = (\tau' \cdot \bar{\tau})(\bar{\xi} \cdot \xi) - (\tau' \cdot \bar{\xi})(\bar{\tau} \cdot \xi) = \bar{\xi} \cdot A \xi;$$

az A mátrix elemei a következők:

$$a_{\alpha\beta} = (\tau' \cdot \bar{\tau}) \delta_{\alpha\beta} - \tau'_\alpha \bar{\tau}_\beta.$$

Eszerint $(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'})$ Laplace-típusú integrál:

$$(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'}) = \int \exp(\bar{\xi} \cdot A \xi) d\mu_3(\xi),$$

s így a Függelék (A5) egyenlete szerint

$$(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'}) = [\det(1 - A)]^{-1} = (1 - \bar{\tau} \cdot \tau')^{-2}. \quad (3.23b)$$

Ezt a kifejezést hatványsorba fejtve kapjuk:

$$(\Phi_\tau, \Phi_{\tau'}) = \sum_{\mu=0}^{\infty} (\mu+1) (\bar{\tau} \cdot \tau')^\mu = \sum_k \frac{(|k|+1)!}{[k!]} \bar{\tau}^{[k]} \tau'^{[k]},$$

ahol $|k| = k_1 + k_2 + k_3$. Ha ezt összehasonlítjuk a (3.23) egyenlettel, a következő eredményt kapjuk:

$$(F_k, F_{k'}) = \begin{cases} 0, & \text{ha } k' \neq k \\ (I+1)!/[k!], & \text{ha } k' = k \end{cases} \quad (I = |k|). \quad (3.24)$$

Ezt az eredményt már idéztük a 3d. szakaszban.

h) *Rekurziós összefüggések.* A Φ függvény deriváltjai:

$$\partial\Phi/\partial\tau_1 = (\zeta_2\eta_3 - \zeta_3\eta_2)\Phi, \quad \partial\Phi/\partial\zeta_1 = (\eta_2\tau_3 - \eta_3\tau_2)\Phi, \quad \partial\Phi/\partial\eta_1 = (\tau_2\zeta_3 - \tau_3\zeta_2)\Phi,$$

ezenkívül hat további egyenlet, amelyek ezekből ciklikus permutációval nyerhetők. Ha a (3.20a) kifejtést ide behelyettesítjük, az f együtthatókra vonatkozóan számos összefüggést nyerünk, amelyek legtöbbje ismert. Két példát említünk.

$$(1) \quad \partial\Phi/\partial\tau_1 = (\zeta_2\eta_3 - \zeta_3\eta_2)\Phi$$

a

$$k_1 f_{k\lambda} = f_{k_1-1 \dots \lambda_2-1 \dots \lambda_3-1} - f_{k_1-1 \dots \lambda_3-1 \dots \lambda_2-1}$$

összefüggést szolgáltatja. (A jobb oldalon csak azokat az indexeket tüntettük fel, amelyek különböznek a bal oldalon álló kifejezés megfelelő indexeitől.)

$$(2) \quad \tau_3 \partial\Phi/\partial\tau_2 + \zeta_3 \partial\Phi/\partial\zeta_2 + \eta_3 \partial\Phi/\partial\eta_2 = 0$$

a

$$-k_2 f_{k\lambda} = (1 + \lambda_2) f_{k_2-1, k_3+1, \lambda_2+1, \lambda_3-1 \dots} + (1 + \lambda_2) f_{k_2-1, k_3+1, \dots, \lambda_2+1, \lambda_3-1}$$

összefüggést szolgáltatja. Behelyettesítve ide a normálási állandókat és áttérve a (j, m) jelölésre, a következő két összefüggést kapjuk a $3-j$ szimbólumokra vonatkozóan:

$$\begin{aligned} (1) \quad & [(I+1)(I-2j_1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = [(j_2+m_2)(j_3-m_3)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2-\frac{1}{2} & j_3-\frac{1}{2} \\ m_1 & m_2-\frac{1}{2} & m_3+\frac{1}{2} \end{pmatrix} - \\ & - [(j_2-m_2)(j_3+m_3)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2-\frac{1}{2} & j_3+\frac{1}{2} \\ m_1 & m_2+\frac{1}{2} & m_3-\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ & [(I-2j_2)(I+1-2j_3)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} + [(j_2+m_2+1)(j_3+m_3)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2-\frac{1}{2} & j_3+\frac{1}{2} \\ m_1 & m_2-\frac{1}{2} & m_3+\frac{1}{2} \end{pmatrix} + \\ (2) \quad & + [(j_2-m_2+1)(j_3-m_3)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2-\frac{1}{2} & j_3+\frac{1}{2} \\ m_1 & m_2+\frac{1}{2} & m_3-\frac{1}{2} \end{pmatrix} = 0. \end{aligned}$$

4. Racah-együtthatók

Ebben a szakaszban a Racah-együtthatókkal foglalkozunk (a Wigner-féle $6-j$ szimbólumok alakjában). A fő cél a generátorfüggvény megszerkesztése és tanulmányozása, valamint annak alkalmazása a Racah-együtthatók szimmetriáinak tárgyalására.

a) *Formális előkészületek.* A $6-j$ szimbólum a $3-j$ szimbólumok kifejezésé-ként a következőképpen definiálható:

$$\left\{ \begin{matrix} j_{23} j_{31} j_{12} \\ j_{01} j_{02} j_{03} \end{matrix} \right\} = \sum_{m_\alpha, m'_\alpha} \left(\begin{matrix} m'_1 m'_2 m'_3 \\ j_{23} j_{31} j_{12} \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_{23} m_2 j_{03} \\ m'_1 j_{02} m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_{01} j_{31} m_3 \\ m_1 m'_2 j_{03} \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} m_1 j_{02} j_{12} \\ j_{01} m_2 m'_3 \end{matrix} \right). \quad (4.1)$$

(Az összegzést m_α -nak és m'_α -nek a megfelelő j -vel összeférő összes értékére kell ki-terjeszteni.)

Az itt bevezetett jelölés célja az, hogy hangsúlyozza a $6-j$ szimbólum tetraéder-szimmetriáját. A V_α csúcsokkal ($\alpha=0, 1, 2, 3$) és a $j_{\alpha\beta}$ élekkel rendelkező tetraéderre utal. A (4.1) egyenletben a $3-j$ szimbólumok rendre a V_0, V_1, V_2, V_3 csúcsokkal szemben elhelyezkedő háromszögeknek felelnek meg. Legyen

$$j_{\alpha\beta} \equiv j_{\beta\alpha} \quad (\alpha \neq \beta; \alpha, \beta = 0, 1, 2, 3). \quad (4.2)$$

A következőkben a $j_{\alpha\beta}$ vagy $k_{\alpha\beta}$ szimbólumokat tartalmazó egyenletekben a *külön-böző* alsó indexek a 0, 1, 2, 3 közül kiválasztott *különböző* egész számokat jelentenek. Eszerint a $V_\beta, V_\gamma, V_\delta$ csúcsokkal rendelkező (az α csúccsal szemben levő) háromszög kerülete

$$I_\alpha = j_{\beta\gamma} + j_{\gamma\delta} + j_{\delta\beta}. \quad (4.3)$$

A (3.10a), (3.10b) egyenletekkel összhangban legyen

$$k_{\alpha\beta} = I_\alpha - 2j_{\gamma\delta} = j_{\gamma\beta} + j_{\delta\beta} - j_{\gamma\delta} \quad (\alpha \neq \beta). \quad (4.4)$$

A tizenkét $k_{\alpha\beta}$ a *rendezett* (α, β) pároktól függ, míg $j_{\alpha\beta}$ definíciójában *közömbös* a sorrend; α a háromszögre utal, β pedig a $j_{\gamma\delta}$ éllel szemben levő csúcsra. A (4.4) összefüggések megfordítása:

$$j_{\gamma\delta} = \frac{1}{2} (k_{\alpha\gamma} + k_{\alpha\delta}). \quad (4.5)$$

Minthogy $j_{\gamma\delta}$ a V_α, V_β csúcsokkal szemben fekvő két háromszöghöz tartozik hozzá, $j_{\gamma\delta} = \frac{1}{2}(k_{\beta\gamma} + k_{\beta\delta})$ ugyancsak fennáll, úgyhogy a k egész számokra teljesül a

$$k_{\alpha\gamma} + k_{\alpha\delta} = k_{\beta\gamma} + k_{\beta\delta} \quad (4.6)$$

kompatibilitási feltétel. Hasznos összefüggések még:

$$k_{\alpha\beta} + k_{\alpha\gamma} + k_{\alpha\delta} = I_\alpha, \quad (4.7)$$

$$k_{\alpha\beta} - k_{\beta\alpha} = k_{\gamma\beta} - k_{\delta\alpha} = I_\alpha - I_\beta. \quad (4.7a)$$

Annak feltétele, hogy (4.1) alatt a $3-j$ szimbólumok zérustól különbözzenek, egyszerűen az, hogy valamennyi $k_{\alpha\beta}$ *nemnegatív egész szám* legyen¹⁷ (ezt a $j_{\alpha\beta}$ -kra vonatkozó háromszög-egyenlőtlenségekből kaphatjuk meg).

A tizenkét $k_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) szám bármely olyan sorozatát, amelyre teljesül a (4.6) kompatibilitási feltétel, „tetraéder-sorozat”-nak nevezzük. Tegyük fel, hogy adva

¹⁷ Ezek a feltételek mindazonáltal nem elégségesek ahhoz, hogy biztosítsák a $j_{\alpha\beta}$ élekkel rendelkező tetraéder létezését. Mi itt a tetraédernek nem a metrikus, hanem a kombinatorikus tulajdonságaival foglalkozunk.

van egy ilyen tetraéder-sorozat; ha $j_{\gamma\delta}$ -t (4.5) definiálja, úgy $j_{\gamma\delta} = j_{\delta\gamma}$, s a (4.4) összefüggések teljesülnek.

Az $\alpha\beta$ rendezett párokat célszerű négy T_α triádba sorolni, amelyeket a következőképpen definiálunk:

$$T_\alpha \text{ azt a három párt tartalmazza, amelyeknek az első eleme } \alpha. \quad (4.8)$$

Szükségünk lesz a négy „transzponált” T_α^* triádra is:

$$T_\alpha^* \text{ azt a három párt tartalmazza, amelyeknek a második eleme } \alpha. \quad (4.8a)$$

Végül pedig bevezetjük a következő három tetrádot:

$$W_1: (01, 10, 23, 32), W_2: (02, 20, 31, 13), W_3: (03, 30, 12, 21). \quad (4.8b)$$

Azon F_k függvényekben, amelyek a (4.1) egyenletben fellépő négy $3-j$ szimbólummal kapcsolatosak, a $k_{\alpha\beta}$ számok abban a sorrendben lépnek fel, amely megfelel a (4.4) egyenletbeli $j_{\gamma\delta}$ -k sorrendjének. Rendre kapjuk tehát:

$$(k_{01}, k_{02}, k_{03})(k_{10}, k_{13}, k_{12})(k_{23}, k_{20}, k_{21})(k_{32}, k_{31}, k_{30}). \quad (4.9)$$

Látható, hogy ez a négy számhármass a négy T_α triádnak felel meg. Az egyes számhármassok első, második és harmadik helyen álló elemei pedig rendre W_1 -nek, W_2 -nek és W_3 -nak felelnek meg.

Legyen $\alpha \rightarrow \pi_\alpha$ a 0, 1, 2, 3 egész számok valamely permutációja (ami a tetraéder négy csúcspontjának permutációjaként is értelmezhető), továbbá legyen

$$j'_{\alpha\beta} = j_{\pi_\alpha, \pi_\beta}, \quad k'_{\alpha\beta} = k_{\pi_\alpha, \pi_\beta}. \quad (4.10)$$

A (4.4)–(4.6) egyenletek továbbra is érvényesek maradnak. A triádok az α -khoz hasonlóan permutálódnak: $T \rightarrow T_{\pi_\alpha}$, $T^* \rightarrow T_{\pi_\alpha}^*$. A π permutáció meghatározza 1, 2, 3 azon π' permutációját, amelyet a W_1, W_2, W_3 tetrádokra kell alkalmaznunk: $W_i \rightarrow W_{\pi'_i}$.

b) Az $R(\tau)$ generátorfüggvény. A (4.1) alatt megadott $6-j$ szimbólum a $k_{\alpha\beta}$ -knak valamely $r(k)$ függvénye. Ha a (4.1) egyenlet jobb oldalán a $()$ szimbólumokat a megfelelő $()_F$ szimbólumokkal helyettesítjük [lásd (3.15a)], azaz ha mind a négy háromszög-koefficienssel osztunk, az

$$r(k) = \left(\frac{\prod_{\alpha, \beta} k_{\alpha\beta}!}{\prod_{\alpha} (I_\alpha + 1)!} \right)^{1/2} s(k) \quad (4.11)$$

egyenlettel meghatározott $s(k)$ függvényt kapjuk. Az eddigiekben az $r(k)$, $s(k)$ függvényeket „tetraéder-sorozat”-ot képező $k_{\alpha\beta}$ -kra definiáltuk. Az összes többi esetben legyen $r(k) = s(k) = 0$.

Definiáljuk a $6-j$ szimbólumok generátorfüggvényét az

$$R(\tau) = \sum_{k_{\alpha\beta}} s(k) \prod_{\alpha, \beta} \tau_{\alpha\beta}^{k_{\alpha\beta}} \quad (4.12)$$

képlettel; $R(\tau)$ a tizenkét $\tau_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) komplex változó függvénye. Az $R(\tau)$ függvény kifejezhető négy Φ generátorfüggvény [lásd (3.20a)] szorzatának integrálja alakjában; e Φ függvények a (4.1)-beli $3-j$ szimbólumoknak felelnek meg. Ebből a cél-

ból bevezetünk hat pár komplex változót; $\zeta^\alpha = (\zeta_\alpha, \eta_\alpha)$ az m_α , $\vartheta^\alpha = (\zeta'_\alpha, \eta'_\alpha)$ az m'_α összegezési indexeknek felel meg a (4.1) egyenletben ($\alpha = 1, 2, 3$). Fennáll:

$$R(\tau) = \int \Phi_0 \Phi_1 \Phi_2 \Phi_3 d\mu_6(\zeta', \eta') d\mu_6(\zeta, \eta), \quad (4.13)$$

$$\Phi_0 = \Phi(\tau_{01}, \tau_{02}, \tau_{03}; \vartheta^1, \vartheta^2, \vartheta^3),$$

$$\Phi_1 = \Phi(\tau_{10}, \tau_{13}, \tau_{12}; {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^1, \zeta^2, {}^t\Gamma\bar{\zeta}^3),$$

$$\Phi_2 = \Phi(\tau_{23}, \tau_{20}, \tau_{21}; {}^t\Gamma\bar{\zeta}^1, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^2, \zeta^3),$$

$$\Phi_3 = \Phi(\tau_{32}, \tau_{31}, \tau_{30}; \zeta^1, {}^t\Gamma\bar{\zeta}^2, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^3). \quad (4.13a)$$

[A négy Φ függvényben a $\tau_{\alpha\beta}$ változók a (4.9) alatt felírt négy számhármastak felelnek meg. A (4.1) egyenletben fellépő m_α felső indexnek a Φ függvényben egy ζ^α argumentum, az alsó m'_α indexeknek pedig egy-egy ${}^t\Gamma\bar{\zeta}^\alpha$ argumentum felel meg; hasonló megállapítás érvényes az m'_α indexekre. Megjegyezzük, hogy ${}^t\Gamma\bar{\zeta}^\alpha = (\bar{\eta}_\alpha, -\bar{\zeta}_\alpha)$.]

A (4.13) integrálekálítás bizonyítása közvetlenül elvégezhető. Ha azonban az egész kifejezést kiírnánk, ez meglehetősen kezelhetetlen egyenleteket eredményezne. Elegendő, ha (4.13) alatt csupán a ζ^1 -re vonatkozó integrált vesszük részletesen szemügyre; Φ_0 és Φ_1 nem tartalmazza ζ^1 -et, úgyhogy csak Φ_2 -t és Φ_3 -at kell vizsgálnunk. Írható:

$$\Phi_2 = \sum_{k_{23}, k_{20}, k_{21}} \tau_{23}^{k_{23}} \tau_{20}^{k_{20}} \tau_{21}^{k_{21}} F_{k_{23}, k_{20}, k_{21}}({}^t\Gamma\bar{\zeta}^1, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^2, \zeta^3),$$

$$\Phi_3 = \sum_{k_{32}, k_{31}, k_{30}} \tau_{32}^{k_{32}} \tau_{31}^{k_{31}} \tau_{30}^{k_{30}} F_{k_{32}, k_{31}, k_{30}}(\zeta^1, {}^t\Gamma\bar{\zeta}^2, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^3).$$

A problémát tovább egyszerűsíti, ha csupán egy Φ_2 -ből kiválasztott F , és egy Φ_3 -ból kiválasztott F járulékát vizsgáljuk meg. A (3.15b) képlet alapján ${}^t\Gamma = \Gamma^{-1}$ tekintetbevételével írhatjuk:

$$F_{k_{23}, k_{20}, k_{21}}({}^t\Gamma\bar{\zeta}^1, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^2, \zeta^3) = \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3} \left(\begin{matrix} j_1 j_2 \mu_3 \\ \mu_1 \mu_2 j_3 \end{matrix} \right)_F \overline{v_{\mu_1}^{j_1}(\zeta^1)} \overline{v_{\mu_2}^{j_2}(\vartheta^2)} v_{\mu_3}^{j_3}(\zeta^3),$$

ahol $2j_1 = k_{20} + k_{21}$, $2j_2 = k_{23} + k_{21}$, $2j_3 = k_{23} + k_{20}$.

Hasonlóképpen

$$F_{k_{32}, k_{31}, k_{30}}(\zeta^1, {}^t\Gamma\bar{\zeta}^2, {}^t\Gamma\bar{\vartheta}^3) = \sum_{v_1, v_2, v_3} \left(\begin{matrix} v_1 l_2 l_3 \\ l_1 v_2 v_3 \end{matrix} \right)_F v_{v_1}^{l_1}(\zeta^1) \overline{v_{v_2}^{l_2}(\zeta^2)} \overline{v_{v_3}^{l_3}(\vartheta^3)},$$

ahol $2l_1 = k_{30} + k_{31}$, $2l_2 = k_{32} + k_{30}$, $2l_3 = k_{32} + k_{31}$.

Ha összeszorozzuk a két F függvényt és ζ^1 -re integráljuk, a v_μ^j -k ortonormált-sága folytán kapjuk: (1) Ha $j_1 \neq l_1$, az eredmény zérus. (2) Ha $j_1 = l_1$, azaz

$$k_{20} + k_{21} = k_{30} + k_{31} \quad (=2j_{01}), \quad (4.14)$$

az eredmény

$$\sum_{\mu_2, \mu_3, v_2, v_3} \left\{ \sum_{\mu} \left(\begin{matrix} j_{01} j_2 \mu_3 \\ \mu \mu_2 j_3 \end{matrix} \right)_F \left(\begin{matrix} \mu l_2 l_3 \\ j_{01} v_2 v_3 \end{matrix} \right)_F \right\} \overline{v_{\mu_2}^{j_2}(\vartheta^2)} v_{\mu_3}^{j_3}(\zeta^3) \overline{v_{v_2}^{l_2}(\zeta^2)} \overline{v_{v_3}^{l_3}(\vartheta^3)}.$$

Ha ugyanezt — lépésről lépésre — a fennmaradó változókra vonatkozóan is elvégezzük, (4.14)-gyel analógiában a (4.6) kompatibilitási relációk közül a többi ötöt

szintén megkapjuk. Ez azt mutatja, hogy csak a „tetraéder-sorozat”-ot képező $k_{\alpha\beta}$ -k szolgáltatnak el nem tűnő járulékokat; azonkívül látható, hogy a „tetraéder-sorozat” járuléka pontosan a $6-j$ szimbólum osztva a négy háromszög-koefficienssel, azaz $s(k)$, amint annak lennie is kell.

Az $R(\tau)$ függvény alább elvégzett kiszámítása egyszerű eredményre vezet¹⁸, nevezetesen

$$R(\tau) = [G(\tau)]^{-2}, \quad G(\tau) = 1 + \sum_{\alpha=0}^3 a_{\alpha} + \sum_{i=1}^3 b_i, \quad (4.15)$$

$$a_0 = \tau_{10} \tau_{20} \tau_{30}, \quad a_1 = \tau_{01} \tau_{31} \tau_{21}, \quad a_2 = \tau_{32} \tau_{02} \tau_{12}, \quad a_3 = \tau_{23} \tau_{13} \tau_{03}, \quad (4.15a)$$

$$b_1 = \tau_{01} \tau_{10} \tau_{23} \tau_{32}, \quad b_2 = \tau_{02} \tau_{20} \tau_{13} \tau_{31}, \quad b_3 = \tau_{03} \tau_{30} \tau_{12} \tau_{21}. \quad (4.15b)$$

Ha a τ változók értéke elég kicsiny (pl. $|\tau_{\alpha\beta}| \leq \frac{1}{2}$ minden α -ra és β -ra), a (4.13) integrál abszolút konvergens; az alább elvégzett operációk jogosak, és a (4.12) hatványsor tagról tagra való integrálással kapható.

c) Az $R(\tau)$ függvény kiszámítása. A (3.21) egyenlet értelmében (4.13) integrandusa az $\exp(D_0 + D_1 + D_2 + D_3)$ alakú, ahol

$$D_0 = \begin{vmatrix} \tau_{01} & \tau_{02} & \tau_{03} \\ \xi'_1 & \xi'_2 & \xi'_3 \\ \eta'_1 & \eta'_2 & \eta'_3 \end{vmatrix}, \quad D_1 = \begin{vmatrix} \tau_{10} & \tau_{13} & \tau_{12} \\ \bar{\eta}'_1 & \xi_2 & \bar{\eta}_3 \\ -\bar{\xi}'_1 & \eta_2 & -\bar{\xi}_3 \end{vmatrix},$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} \tau_{23} & \tau_{20} & \tau_{21} \\ \bar{\eta}_1 & \bar{\eta}'_2 & \xi_3 \\ -\bar{\xi}_1 & -\bar{\xi}'_2 & \eta_3 \end{vmatrix}, \quad D_3 = \begin{vmatrix} \tau_{32} & \tau_{31} & \tau_{30} \\ \xi_1 & \bar{\eta}_2 & \bar{\eta}'_3 \\ \eta_1 & -\bar{\xi}_2 & -\bar{\xi}'_3 \end{vmatrix}.$$

A $\sum_{\alpha=0}^3 D_{\alpha}$ kitevő ciklikus szimmetriája az 1, 2, 3 indexekben nagymértékben csökkenti a kiszámítás munkáját. Valójában csupán néhány tagot kell ténylegesen kiszámítanunk. Kapjuk:

$$D_1 + D_2 + D_3 = \sum_{\alpha=1}^3 (c_{\alpha} \bar{\xi}'_{\alpha} + d_{\alpha} \bar{\eta}'_{\alpha}) - E,$$

$$c_1 = \tau_{12} \xi_2 - \tau_{13} \bar{\eta}_3, \quad c_2 = \tau_{23} \xi_3 - \tau_{21} \bar{\eta}_1, \quad c_3 = \tau_{31} \xi_1 - \tau_{32} \bar{\eta}_2,$$

$$d_1 = \tau_{12} \eta_2 + \tau_{13} \bar{\xi}_3, \quad d_2 = \tau_{23} \eta_3 + \tau_{21} \bar{\xi}_1, \quad d_3 = \tau_{31} \eta_1 + \tau_{32} \bar{\xi}_2,$$

$$E = \tau_{10}(\bar{\xi}_3 \xi_2 + \bar{\eta}_3 \eta_2) + \tau_{20}(\bar{\xi}_1 \xi_3 + \bar{\eta}_1 \eta_3) + \tau_{30}(\bar{\xi}_2 \xi_1 + \bar{\eta}_2 \eta_1).$$

Első lépés: Integrálás ξ' -re és η' -re. Az (1.12a) egyenlet értelmében

$$\int \exp(c \cdot \bar{\xi}' + d \cdot \bar{\eta}') \exp(D_0 - E) d\mu_6(\xi', \eta') = \exp f,$$

$$f = \begin{vmatrix} \tau_{01} & \tau_{02} & \tau_{03} \\ c_1 & c_2 & c_3 \\ d_1 & d_2 & d_3 \end{vmatrix} - E.$$

¹⁸ A jelölésektől eltekintve ez megegyezik Schwinger (4.18) egyenletével.*

Helyettesítsük be ide c_α és d_α kifejezését; kapjuk:

$$f = \sum_{\alpha=1}^3 u_\alpha \bar{\delta}_\alpha + \sum_{\alpha=1}^3 v_\alpha \delta_\alpha - \bar{\xi} \cdot H \xi - \bar{\eta} \cdot H \eta, \quad (4.16)$$

ahol δ_α a (3.9) determinánsok jele,

$$u_1 = \tau_{02} \tau_{13} \tau_{32}, \quad u_2 = \tau_{03} \tau_{21} \tau_{13}, \quad u_3 = \tau_{01} \tau_{32} \tau_{21},$$

$$v_1 = \tau_{03} \tau_{12} \tau_{23}, \quad v_2 = \tau_{01} \tau_{23} \tau_{31}, \quad v_3 = \tau_{02} \tau_{31} \tau_{12},$$

és H a következő mátrix:

$$H = \begin{pmatrix} a_1 & -\tau_{03} \tau_{12} \tau_{21} & \tau_{20} \\ \tau_{30} & a_2 & -\tau_{01} \tau_{23} \tau_{32} \\ -\tau_{02} \tau_{13} \tau_{31} & \tau_{10} & a_3 \end{pmatrix};$$

az a_α -kat (4.15a) alatt definiáltuk.

Második lépés: Integráció ξ -re és η -ra. A Függelék (A8) képlete értelmében

$$\int \exp f d\mu_6(\xi, \eta) = [\det(1 + H) - u \cdot v - u \cdot H v]^{-2}; \quad (4.16a)$$

direkt számítás adja a (4.15) kifejezést.

d) A 6-j szimbólumok szimmetriái. Célszerű a $k_{\alpha\beta}$ -kat és a $\tau_{\alpha\beta}$ -kat mátrix-alakban elrendezni:

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} k_{10} & k_{20} & k_{30} \\ k_{01} & k_{31} & k_{21} \\ k_{32} & k_{02} & k_{12} \\ k_{23} & k_{13} & k_{03} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J} = \begin{pmatrix} \tau_{10} & \tau_{20} & \tau_{30} \\ \tau_{01} & \tau_{31} & \tau_{21} \\ \tau_{32} & \tau_{02} & \tau_{12} \\ \tau_{23} & \tau_{13} & \tau_{03} \end{pmatrix}; \quad (4.17)$$

itt a sorok a négy transzponált T_α^* triádnak felelnek meg, az oszlopok pedig a három W_1, W_2, W_3 tetrádnak. A (4.15) generátorfüggvényben a_α az \mathcal{J} mátrix α indexű sorában álló elemek szorzata, b_i pedig az i -edik oszlop elemei.

A (4.7) egyenlet szerint I_α a T_α triádhoz tartozó k számok összege. Hasonlóképpen bevezethetjük I_α^* -ot, mely jelölje a T_α^* transzponált triádhoz tartozó w_i számok összegét, továbbá w_i -t, amely legyen egyenlő a W_i tetrádhoz tartozó k számok összegével. (Ezzel ekvivalens, ha azt mondjuk, hogy I_α^* a \mathcal{K} mátrix α indexű sorában álló elemek összege, w_i pedig az i -edik oszlop elemeinek összege.) Nyilvánvalóan fennáll:

$$\sum_{\alpha=0}^3 I_\alpha = \sum_{\alpha=0}^3 I_\alpha^* = \sum_{i=1}^3 w_i = |\mathcal{K}| \equiv \sum_{\alpha, \beta} k_{\alpha\beta}. \quad (4.17a)$$

Ha \mathcal{K} elemei „tetraéder-sorozat”-ot alkotnak, úgy (4.7a) értelmében

$$I_\alpha^* - I_\alpha = \sum_{\beta} (k_{\beta\alpha} - k_{\alpha\beta}) = \sum_{\beta} (I_\beta - I_\alpha),$$

vagy

$$I_\alpha^* = |\mathcal{K}| - 3I_\alpha. \quad (4.17b)$$

A (4.12) egyenlet mintájára írható:

$$R(\mathcal{J}) = \sum_K s(\mathcal{K}) \prod_{\alpha, \beta} \tau_{\alpha\beta}^{k_{\alpha\beta}}.$$

Jelöljük az \mathcal{J} és \mathcal{K} mátrixokból elemeik adott permutációja útján nyert mátrixokat, mint már a 3f. szakaszban is tettük, $P(\mathcal{J})$ -vel, ill. $P(\mathcal{K})$ -val. Ekkor írhatjuk:

$$R(P(\mathcal{J})) = \sum_K s(P(\mathcal{K})) \prod_{\alpha, \beta} \tau_{\alpha\beta}^{k_{\alpha\beta}}.$$

Következésképpen, ha $R(P(\mathcal{J})) = R(\mathcal{J})$, úgy minden \mathcal{K} -ra fennáll: $s(P(\mathcal{K})) = s(\mathcal{K})$.

Ez a megjegyzés adja a kezünkbe a szimmetria-operációk Regge-féle csoportját. Valóban, R invariáns (1) a sorok tetszőleges permutációjával szemben (ez az a_α -kat permutálja és a b_i -ket változatlanul hagyja), (2) az oszlopok tetszőleges permutációjával szemben (ez a b_i -ket permutálja és az a_α -kat változatlanul hagyja).

A I_α -kat az előbbi típusú operációk permutálják, a második fajtába tartozók változatlanul hagyják, amint az (4.17b)-ből következik. Ennélfogva a (4.11) képletben fellépő normálási tényezőt nem érintik mindezek az operációk, és így mindaz, amit az $s(\mathcal{K})$ -kra bebizonyítottunk, érvényes az $r(\mathcal{K})$ -kra, azaz a $6-j$ szimbólumokra is. [A k egész számok tetszőleges permutációjához a j számok megfelelő transzformációját (4.4) és (4.5) alapján határozhatjuk meg.]

A fent felsorolt szimmetria-operációk a $24 \cdot 6 = 144$ -edrendű $S_4 \times S_3$ csoportot (az S_3 és S_4 szimmetrikus csoportok direkt szorzatát) generálják. Elemei: a \mathcal{K} sorainak π és oszlopainak σ permutációiból képezett szorzatok; π és σ egymástól függetlenül választható. A korábban ismert szimmetria-operációk a (4.10) transzformációk; ezeket a tetraéder csúcsainak azon permutációi indukálják, amelyben σ nem független π -től, hanem egyenlő π' -vel.

e) A $6-j$ szimbólum explicit kifejezése. Fejtsük hatványsorba $R = G^{-2}t$; kapjuk:

$$R = \sum_{z=0}^{\infty} (-1)^z (z+1) \left(\sum_{\alpha=0}^3 a_\alpha + \sum_{i=1}^3 b_i \right)^z = \sum_{v_\alpha, \omega_i} (-1)^z (z+1)! \left(\prod_{\alpha=0}^3 \frac{a_\alpha^{v_\alpha}}{v_\alpha!} \prod_{i=1}^3 \frac{b_i^{\omega_i}}{\omega_i!} \right),$$

ahol v_α és ω_i egymástól függetlenül minden nemnegatív egész értéken végigfut, és $z = \sum_\alpha v_\alpha + \sum_i \omega_i$. Ez a következő kifejezésre vezet:

$$s(\mathcal{K}) = \sum \frac{(-1)^z (z+1)!}{v_0! v_1! v_2! v_3! \omega_1! \omega_2! \omega_3!}. \quad (4.18)$$

Az összegzés kiterjed mindazon nemnegatív értékekre, amelyek eleget tesznek a

$$\mathcal{K} \equiv \begin{pmatrix} k_{10} & k_{20} & k_{30} \\ k_{01} & k_{31} & k_{21} \\ k_{32} & k_{02} & k_{12} \\ k_{23} & k_{13} & k_{03} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_0 + \omega_1 & v_0 + \omega_2 & v_0 + \omega_3 \\ v_1 + \omega_1 & v_1 + \omega_2 & v_1 + \omega_3 \\ v_2 + \omega_1 & v_2 + \omega_2 & v_2 + \omega_3 \\ v_3 + \omega_1 & v_3 + \omega_2 & v_3 + \omega_3 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{N} \quad (4.19)$$

mátrix-egyenletnek; másképpen:

$$k_{\alpha\beta} = v_\beta + \omega_i \quad (\alpha, \beta) \in W_i. \quad (4.19a)$$

A $6-j$ szimbólumot ekkor

$$\left\{ \begin{matrix} j_{23} j_{31} j_{12} \\ j_{01} j_{02} j_{03} \end{matrix} \right\} = \left(\frac{\prod_{\alpha, \beta} k_{\alpha\beta}!}{\prod_{\alpha} (I_{\alpha} + 1)!} \right)^{1/2} s(\mathcal{K}) \quad (4.19b)$$

adja meg [lásd (4.11)]; a j és k számok kapcsolatát a (4.4) és (4.5) egyenletek fejezik ki.

A $\mathcal{K} = \mathcal{N}$ egyenlet (ahol is feltesszük, hogy k, v, ω nemnegatív egész számok) a (4.18) kifejezésre való alkalmazásán kívül azért is számot tart érdeklődésünkre, mert a „tetraéder-sorozat”-ot képező \mathcal{K} elemeket magában egyesítő mátrix paraméterezését szolgáltatja. Nem nehéz megmutatni, hogy a $k_{\alpha\beta}$ számok akkor és csak akkor képeznek „tetraéder-sorozat”-ot, ha valamilyen \mathcal{N} mellett \mathcal{K} -ra teljesül (4.19). Azonfelül adott mellett a $\mathcal{K} = \mathcal{N}$ egyenletnek $\mu + 1$ megoldása van, ahol μ a \mathcal{K} mátrix legkisebb eleme; így (4.18)-nak $\mu + 1$ tagja van.

A szimmetria-operációk hatása. Legyen P a Regge-csoport valamely eleme, amelyet a π és σ permutációk jellemeznek. Ha $\mathcal{K} = \mathcal{N}$, úgy $P(\mathcal{K}) = \mathcal{N}'$; az \mathcal{N}' mátrix paramétereit a $v'_\alpha = v_{\pi_\alpha}$, $\omega'_i = \omega_{\sigma_i}$ egyenletek határozzák meg.

Racah képlete.¹⁹ Abból a célból, hogy megkapjuk Racah híres kifejezését $s(\mathcal{K})$ -ra vonatkozóan, csupán ki kell fejeznünk v_α -t és ω_i -t z segítségével. A (4.19), (4.7a) egyenletekből kapjuk: $k_{\alpha 0} - k_{0\alpha} = v_0 - v_\alpha = I_\alpha - I_0$. Továbbá

$$v_0 + I_0 = v_0 + k_{01} + k_{02} + k_{03} = \sum_{\alpha=0}^3 v_\alpha + \sum_{i=1}^3 \omega_i = z$$

[ez (4.19) folyománya], és így

$$v_\alpha = z - I_\alpha. \quad (4.20)$$

A (4.19) egyenlet első sora az $\omega_i = k_{i0} - v_0$ egyenlőséget szolgáltatja, és így

$$\omega_i = t_i - z, \quad t_i = k_{i0} + I_0. \quad (4.20a)$$

A $j_{\alpha\beta}$ -k segítségével is kifejezhetjük t_i -t:

$$\begin{aligned} t_1 &= j_{02} + j_{03} + j_{12} + j_{13}, \\ t_2 &= j_{03} + j_{01} + j_{23} + j_{21}, \\ t_3 &= j_{01} + j_{02} + j_{31} + j_{32}. \end{aligned} \quad (4.20b)$$

Behelyettesítve v_α -t és ω_i -t (4.18)-ba Racah képletét kapjuk:

$$s(\mathcal{K}) = \sum_z \frac{(-1)^z (z+1)!}{\prod_{\alpha} (z - I_{\alpha})! \prod_i (t_i - z_i)!};$$

az összegezést z azon értékeire kell kiterjesztenünk, amelyek mellett valamennyi v_α és $\omega_i \geq 0$.

¹⁹ Racah ¹³ alatt idézett munkája, (36) egyenlet; Edmonds könyve¹³, (6.3.7) egyenlet.

Könnyű megmutatni, hogy $4t_i = w_i + |\mathcal{H}|$. A Regge-féle operációk eszerint az $I'_\alpha = I_{\pi_\alpha}$, $t'_i = t_{\sigma_i}$ egyenletek segítségével is leírhatók.

Megjegyzés. Schwinger a $9-j$ szimbólum generátorfüggvényét is kiszámította [lásd ⁶, (4.37) egyenlet]. Ez nem mutat semmilyen új szimmetriát, legalább is olyat, amely a $k_{\alpha\beta}$ mennyiségek permutálásával volna kapható.

f) *Rekurziós összefüggések.* Jelölje $\Omega_{\alpha\beta}$ a $\tau_{\alpha\beta}\partial/\partial\tau_{\alpha\beta}$ differenciáloperátort. Ekkor $\Omega_{\alpha\beta}G = g_{\alpha\beta}$, ahol $g_{\alpha\beta} = a_\beta + b_i$, ha $(\alpha, \beta) \in W_i$. Innen következik:

$$\Omega_{\alpha\beta}R = -2g_{\alpha\beta}G^{-3}$$

továbbá $g_{\gamma\delta}\Omega_{\alpha\beta}R = g_{\alpha\beta}\Omega_{\gamma\delta}R$, ami az $s(k)$ -ra vonatkozó rekurziós összefüggéseket szolgáltat. Példaként vegyük szemügyre a $g_{32}\Omega_{01}R = g_{01}\Omega_{32}R$ egyenlőséget. Fennáll: $g_{32} = a_2 + b_1$, $g_{01} = a_1 + b_1$, úgyhogy

$$a_2\Omega_{01}R = a_1\Omega_{32}R + b_1(\Omega_{32} - \Omega_{01})R.$$

Felhasználva R hatványsorát, kapjuk:

$$k_{01}s(k) = (k_{32}+1)s(\dots k_{02}+1, k_{12}+1, k_{32}+1, \dots k_{01}-1, k_{21}-1, k_{31}-1, \dots) + \\ + (k_{32}+1-k_{01})s(\dots k_{02}+1, k_{12}+1, \dots k_{01}-1, k_{10}-1, k_{23}-1, \dots),$$

ahol a jobb oldalon ismét csak azokat a k -kat jeleztük, amelyek a bal oldalon álló, megfelelő értékektől különböznek. A $6-j$ szimbólumokra kapjuk:

$$\begin{aligned} & [(I_2+1)k_{01}(k_{02}+1)(k_{12}+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_{23} j_{31} j_{12} \\ j_{01} j_{02} j_{03} \end{Bmatrix} = \\ & = [(I_1+2)k_{21}k_{31}(k_{32}+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_{23} + \frac{1}{2} & j_{31} - \frac{1}{2} & j_{12} \\ j_{01} - \frac{1}{2} & j_{02} + \frac{1}{2} & j_{03} \end{Bmatrix} + \\ & + (k_{32}+1-k_{01})[k_{01}k_{23}]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_{23} + \frac{1}{2} & j_{31} - \frac{2}{1} & j_{12} \\ j_{01} & j_{02} & j_{03} - \frac{1}{2} \end{Bmatrix}. \end{aligned}$$

Függelék

Néhány Laplace-típusú integrál kiszámítása

(a) Legyen

$$A(B) = \pi^{-n} \int \exp(-\bar{z} \cdot Bz) d^n z, \quad (A1)$$

ahol a B komplex mátrixnak n sora és n oszlopa van; elemeit jelölje b_{kl} , úgyhogy

$$\bar{z} \cdot Bz = \sum_{k,l=1}^n \bar{z}_k b_{kl} z_l.$$

Integrálni az egész C_n térre kell; $d^n z = \prod_{k=1}^n dx_k dy_k$ ($z_k = x_k + iy_k$).

Minden B mátrix egyértelműen felbontható a $B' + iB''$ alakban, ahol B' és B'' hermitikus; B' -t a B mátrix *hermitikus részének* nevezzük.

Ha B' pozitív definit, az (A1) integrál abszolút konvergens, és

$$\Lambda(B) = (\det B)^{-1}. \quad (\text{A2})$$

Bizonyítás. Állításunkat három lépésben bizonyítjuk be. (1) Ha $B=1$, úgy $\Lambda=1$. [Ez az (1.6) egyenlet a $h=h'=0$ speciális esetben.] (2) Ha $B''=0$ és B pozitív definit, akkor létezik olyan S nonszinguláris mátrix, amelyre fennáll

$$B = S^* S. \quad (\text{A3})$$

A $z' = Sz$ (és $\bar{z}' = \bar{S}\bar{z}$) új változókat bevezetve kapjuk: $\bar{z} \cdot Bz = \bar{z}' \cdot z'$. Ezzel igazoltuk, hogy az integrál abszolút konvergens. Legyen $z'_k = x'_k + iy'_k$ a transzformáció Jacobi-determinánsa

$$\frac{\partial(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n)}{\partial(x'_1, \dots, x'_n, y'_1, \dots, y'_n)} = (\det S \cdot \det \bar{S})^{-1} = (\det B)^{-1}. \quad (\text{A3a})$$

Ezzel beláttuk, hogy $\Lambda(B) = (\det B)^{-1} \Lambda(1)$, Q.E.D. (3) Legyen most $B = B' + iB''$, ahol B' pozitív definit és B'' tetszőleges. Az integrandus abszolútértéke $\exp(-\bar{z} \cdot B'z)$, amivel az abszolút konvergencia bizonyítást nyert.

Legyen $\vartheta = \vartheta_1 + i\vartheta_2$ egy komplex paraméter, legyen továbbá $C(\vartheta) = B' + i\vartheta B''$, úgyhogy

$$C(0) = B', \quad C(1) = B. \quad (\text{A4})$$

A $C(\vartheta)$ mátrixot felbonthatjuk a $C'(\vartheta) + iC''(\vartheta)$ alakban, ahol

$$C'(\vartheta) = B' - \vartheta_2 B'', \quad C''(\vartheta) = \vartheta_1 B''. \quad (\text{A4a})$$

A ϑ_2 paraméter kicsiny értékeire $C'(\vartheta)$ közel esik B' -höz, úgyhogy alkalmas κ konstans mellett fennáll:

$$\bar{z} \cdot C'(\vartheta)z > \frac{1}{2} \bar{z} \cdot B'z, \quad \text{ha} \quad |\vartheta_2| < \kappa.$$

Korlátozzuk most ϑ -t a $|\vartheta_2| < \kappa$ sávra, és mutassuk meg, hogy $\Lambda(C(\vartheta))$ analitikus függvénye ϑ -nak. Ebből a célból elegendő megjegyeznünk, hogy az $\exp(-\bar{z} \cdot C(\vartheta)z)$ integrandus ϑ -ban nyilvánvalóan analitikus, és hogy abszolút értéke, az $\exp(-\bar{z} \cdot C'(\vartheta)z)$ függvény egyenletesen korlátos; egy korlátja az $\exp(-\frac{1}{2}\bar{z} \cdot B'z)$ integrálható függvény. Ha ϑ képzetes, C hermitikus és pozitív definit [lásd (A4a)]; erre az esetre a $\Lambda(C(\vartheta)) = [\det C(\vartheta)]^{-1}$ egyenletet már bebizonyítottuk. Az analiticitás folyományaképpen az érvényes marad az egész $|\vartheta_2| < \kappa$ sávban, speciálisan $C(1) = B$ -re.

Korollárium.

$$I(A) = \int \exp(\bar{z} \cdot Az) d\mu_n(z) = [\det(1 - A)]^{-1}, \quad (\text{A5})$$

feltéve, hogy $1 - A$ hermitikus része pozitív definit, speciálisan ha A mátrixelemei elég kicsinyek. Tekintetbe véve $d\mu_n(z)$ definícióját [lásd (1.5)], kapjuk: $I(A) = \Lambda(1 - A)$.

(b) Legyen

$$M(B, a, b) = \pi^{-6} \int \exp g(B, a, b; \xi, \eta) d^3 \xi d^3 \eta, \quad (\text{A6})$$

$$g = -\bar{\xi} \cdot B \xi - \bar{\eta} \cdot B \eta + D(\bar{a}, \bar{\xi}, \bar{\eta}) + D(b, \xi, \eta). \quad (\text{A6a})$$

Itt ξ és η a C_3 tér pontjai, B 3×3 -as mátrix, a és b konstans vektorok a C_3 térben, D -nek pedig ugyanaz a jelentése, mint a 3f. szakaszban: determinánst jelöl. Most is, mint az előbb, három lépésben járunk el. (1) Ha $B=1$, ez megegyezik a (3.23a) integrállal; elég kicsiny a, b mellett (3.23b) értelmében $M(1, a, b) = (1 - \bar{a} \cdot b)^{-2}$. (2) Ha B pozitív definit hermitikus mátrix, elég kis a, b esetén M abszolút konvergens (például ha $\bar{a} \cdot Ba < \det B$ és $\bar{b} \cdot Bb < \det B$). Mint fent, legyen ismét $B = S^* S$, legyen továbbá $\sigma = \det S$, és vezessük be a $\xi' = S\xi$, $\eta' = S\eta$ új változókat. Legyen ezenkívül $a' = Sa$ és $b' = Sb$. Ekkor

$$\bar{\xi} \cdot B \xi = \bar{\xi}' \cdot \xi', \quad \bar{\eta} \cdot B \eta = \bar{\eta}' \cdot \eta',$$

$$D(\bar{a}, \bar{\xi}, \bar{\eta}) = \bar{\sigma}^{-1} D(\bar{a}', \bar{\xi}', \bar{\eta}') = D(\bar{a}'', \bar{\xi}', \bar{\eta}'),$$

$$D(b, \xi, \eta) = \sigma^{-1} D(b', \xi', \eta') = D(b'', \xi', \eta'),$$

ahol $a'' = \sigma^{-1} a'$, $b'' = \sigma^{-1} b'$. Így tehát

$$g(B, a, b; \xi, \eta) = g(1, a'', b''; \xi', \eta').$$

Az (A3a)-nak megfelelő Jacobi-determináns $(\sigma \bar{\sigma})^{-2}$ -nal egyenlő. Eszerint $M(B, a, b) = (\sigma \bar{\sigma})^{-2} M(1, a'', b'') = [\sigma \bar{\sigma} (1 - \bar{a}'' \cdot b'')^{-2}] = (\sigma \bar{\sigma} - \bar{a}' \cdot b')^{-2}$. Tudjuk: $\sigma \bar{\sigma} = \det B$, és $\bar{a}' \cdot b' = \bar{a} \cdot Bb$. Ennélfogva

$$M(B, a, b) = (\det B - \bar{a} \cdot Bb)^{-2}. \quad (\text{A7})$$

(3) Ha B nem hermitikus, de hermitikus része pozitív definit, analitikus folytatás segítségével ismét megmutathatjuk, hogy (A7) érvényes marad.

A 4c. szakaszban az

$$N(H, \bar{u}, v) = \int \exp g(H, \bar{u}, v; \xi, \eta) d\mu_3(\xi) d\mu_3(\eta)$$

integrál kiszámítása vált szükségessé. Mivel $d\mu_3(\xi) d\mu_3(\eta)$ magában foglalja az $\exp(-\bar{\xi} \cdot \xi - \bar{\eta} \cdot \eta)$ faktort, következik, hogy $N(H, \bar{u}, v) = M(1 + H, \bar{u}, v)$ és így

$$N(H, \bar{u}, v) = [\det(1 + H) - u \cdot v - u \cdot Hv]^{-2}. \quad (\text{A8})$$

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. III. 10. — Terjedelem: 7,35 (A/5) ív
71-2866 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11498, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Ketskemény I., Kozma L., Farkas É., Rácz B.</i> : Eljárás igen gyengén abszorbeáló és fényeszóró közegek spektrofotometriai vizsgálatára	315
<i>Raics Péter és Daróczy Sándor</i> : Tapasztalatok Ge(Li) γ -spektrumok simításával kapcsolatban	327
<i>Pardaviné Horváth Márta</i> : Nagy nyomások és hatásuk egyes anyagok mágneses tulajdonságaira	343

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

MTA Akusztikai Kutatócsoport	361
BME Fizikai Kémiai Tanszék	361
MTA Lumineszcencia és Félvezető Tanszéki Kutatócsoport:	362
MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet	362

KÖNYVISMERTETÉS

<i>P. L. Butzer and B. Sz.-Nagy</i> (Editors): Abstract Spaces and Approximation. Proceedings of the Conference held at the Mathematical Research Institute at Oberwolfach, Black Forest, July 18—27, 1968. Edited by (Gy. G.)	364
<i>Christofer Cronström</i> (Editor): Topics in Theoretical Physics, Editor. Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1967. (Gy. G.)	364
<i>Dan Olof Riska</i> (Editor): Topics in Theoretical Physics, Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1968. (Gy. G.)	360

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>V. Bargmann</i> : A forgáscsoport ábrázolásairól.	365
---	-----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

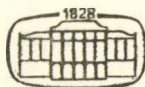
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás kölszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak sedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

A KVANTUMTÉRELMELET ALAPELVEI ÉS LEGÚJABB EREDMÉNYEI V. A WIGHTMAN-ELMÉLET ÁLTALÁNOSÍTÁSAI, NEMPOLINOMIÁLIS LAGRANGE FÜGGVÉNYEK*

PÓCSIK GYÖRGY

Eötvös Loránd Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszéke

A kvantumtérelmélet két aktuális irányában legutóbb elért eredményeket tárgyaljuk egységes szempontból. Ismertetjük a Wightman-elmélet polinomnál gyorsabban növő mátrixelemekre történő kiterjesztéseinek főbb változatait. A dolgozat második részében a nempolinomiális Lagrange-függvények fizikai szerepéről és a „nemrenormálható” elméletek végességéről alkotott jelenlegi képet tekintjük át.

1. §. Bevezetés

A kvantumtérelméletre is érvényes az a szabály, hogy időnként az érdeklődés homlokteréből háttérbe szorul, máskor viszont új ötletekkel és eredményekkel kecsesget. Az első sikerek után a harmincas évek végén eljött a végtelenek időszaka, 1947 után ezt követték a relativisztikus kvantumelektrodinamika kísérleti és elméleti sikereinek évei. Bár e sikereket nem tudták megismételni az erős kölcsönhatásoknál, illetve a gyenge kölcsönhatásoknál magasabb rendben, mégis megmaradt a véges térelmélet létezésének reménye. Ezen túlmenően, 1955 és 1960 közt megszülettek a különféle axiomatikus tárgyalásmódok (a Wightman tárgyalásról [1–4]-ben számoltunk be, az LSZ-módszer leírása [5]-ben látható), melyek az áramok lokálisán keresztül a szórásamplitúdókra érvényes diszperziós összefüggésekre vezettek. Ez a térelméleti szemléletmód vezetett a tiszta analitikus felfogásra, sőt még a nagyenergiás tartományban használt Regge viselkedés is levezethető térelméleti modellekből.

Az elmúlt évtizedben a térelméleti-módszerek és gondolkodásmód nemcsak a részecskefizikában vált otthonossá, hanem más területeken is, mint pl. szilárdtestfizika. Ami a részecskefizikát illeti, az utóbbi tíz évben a hangsúly az algebrai rendszerezésre, áramalgebrára, nagyenergiájú fizikára tolódott. Bár a rendszerezéssel kapcsolatban közismert, hogy pl. sok térelméleti modell született, mégis inkább az áramalgebra támaszkodik térelméleti fogalmakra; mindez azonban együttjárt a térelméleti kutatások gyengülésével.

A legutóbbi 3–4 évben ismét tanúi lehetünk a térelméleti kutatások fokozódásának, amint azt az 1970-es Kievi Nemzetközi Részecskefizikai Konferencia is jól mutatta. Úgy véljük, hogy ezt a következő két lehetőségnek legalábbis az egyike magyarázza. 1. Általában az algebrai+analitikus módszerek szolgáltatata eredményeket mindig reprodukálhatjuk effektív Lagrange-függvény használatával. Pl. az

* Érkezett 1971. március 30.

áramalgebra sok alacsonyenergiás tételét megkaphatjuk az $SU_2 \times SU_2$, ill. $SU_3 \times SU_3$ csavar szimmetriák térelméleti megfogalmazásából „fa”-közelítésben (effektív Lagrange-függvények, l. pl. [6]). Sokan remélik, hogy megfelelő Lagrange függvények magasabb közelítésben még jobb választ adnak. Ezzel ismét előtérbe került a nemrenormálható elméletek végességének régi problematikája.

2. A Lagrange térelmélet rendelkezik azzal a lehetőséggel, hogy nagyon kevés paraméterből számíthassunk ki sok kísérleti információt. Mind a mai napig nem áll ehhez hasonló lehetőség rendelkezésre a részecskefizikában.

A feladat tehát kettős: minthogy nemrenormálható elméletre jutottunk (perturbációszámításban), meg kell vizsgálni, hogy a gyorsan növekvő amplitúdók milyen elméleti keretbe tartoznak (érvényes-e abban a CTP-tétel stb.) és a fontosabb nemrenormálható elméletek erőszakmentesen végesednek-e (valamilyen nemperturbációs módszer keretében). Gyakorlati szempontból különösen e második probléma jelentős. Minthogy a nagyenergiás amplitúdók, hatáskeresztmetszetek jelenlegi tudásunk szerint nem növekednek az energiával, ennek megfelelő véges nemrenormálható elméletet keresünk. Nem zárhatók ki azonban egyes véges nemrenormálható, gyorsan növekvő amplitúdókat tartalmazó térelméletek sem.

A dolgozat két fő részre oszlik, az elsőben az axiomatikus fejtegetéseket [1]–[4]-hez csatlakoztatva közöljük, a másodikban pedig a nempolinomiális Lagrange-függvények szerepét elemezzük.

2. §. Általánosított függvények és térelmélet

Az ötvenes években általános hit volt, hogy a kölcsönhatásokat perturbációszámításban renormálható térelmélet írja le. Egy ilyen térelméletben az amplitúdók a tömeghétől távol nem növekednek polinomnál gyorsabban, pl. a kétrészecske szórás létragrafjainak összege nagyenergián Regge-viselkedést mutat [7], stb. Minthogy a nagyenergiás korlátokat a próbafüggvények tere szabja meg, szükségképpen fel kellett tételezni, hogy a tér operátor értékű mérsékelt disztribúció [1]. Ezt a feltevést először Wightman vitte következetesen keresztül. A Wightman elmélet leírását [1]–[4]-ben találjuk meg. Wightman axiomatikájában bizonyítható: 1. spin és statisztika kapcsolata [4], 2. CPT-tétel [4], 3. aszimptota feltétel [8], 4. keresztkezési szimmetria [9], 5. diszperziós relációk [10] és más állítások, mint pl. az amplitúdók polinomiális korlátja [4].

Az eredeti Wightman-keret azonban túl szűk, hiszen az erős kölcsönhatások széles osztálya, valamint a gyenge kölcsönhatások nem tartoznak a renormálható kategóriába és egyes részsorok felösszegzése a fénykúpon lényeges szingularitásokra vezet. Pl. vektormezon-fermion vektorkölcsönhatás esetén a B -tér járuléka a fermion-propagátorhoz [11]

$$\exp \left[\frac{ig^2}{m^2} (\Delta_F(0) - \Delta_F(x^2)) \right]. \quad (1)$$

A fermion tér nyilvánvalóan nem lehet mérsékelt. Hasonló jelenség ellenőrizhető a

$$\varphi(x) = : \exp A(x) : \quad (2)$$

tér esetében, ahol $A(x)$ szabad skalár tér. A kétpontfüggvény

$$\langle 0 | \varphi(x) \varphi(y) | 0 \rangle = \exp(-i\Delta_+(x-y)) \quad (3)$$

nem tartozik az \mathcal{S}^* osztályba [1].

A (3) típusú Wightman-függvények értelmezésére \mathcal{S}^* -nál tágabb osztályt kell keresnünk. Minthogy példáink az impulzustérben a végtelenben lényeges szingularitást mutatnak, többen javasolták, hogy a próbafüggvények a \mathcal{D}_p osztályba [1] tartozzanak. A kompakt tartójú próbafüggvények \mathcal{D}_p tere azonban nem alkalmas a lokalitás megfogalmazására. Güttinger [12] javasolta, hogy a vákuumértékeket általánosított függvényeknek (lineáris folytonos funkcionál) tekintjük a $Z(M_r)$ téren.

$Z(M_r)$ definíciója a következő. Jelölje $\{M_r(z)\}$ a z komplex változóval folytonosan változó függvények sorozatát:

$$0 < C(y) \leq M_1(z) \leq \dots \leq M_r(z) \leq \dots, \quad z = x + iy, \quad (4)$$

ahol z n -dimenziós pont, $C(y)$ valamilyen folytonos függvény. $Z(M_r)$ azoknak a $\psi(z)$ analitikus egész függvényeknek tere, melyre a

$$\|\psi\|_r = \sup_z M_r(z) |\psi(z)|, \quad 1 \leq r < \infty \quad (5)$$

norma véges. Az

$$M_r = \exp(-a|y|) \max_{|k| \leq r} |z^k|, \quad a > 0 \quad (6)$$

választással az exponenciális típusú egész függvények $Z(a)$ terét kapjuk. Ezekre fennáll

$$|z^k \psi(z)| \leq C_k \exp(a|y|) \quad k = 0, 1, \dots, \quad (7)$$

ahol a független ψ -től, a C_k állandó azonban függ. Változó a -val tekintjük a $Z(a)$ terek egyesítését, az eredmény az egész függvények Z tere. A Z tér kitüntetett szerepe a \mathcal{D} térbeli függvények Fourier-transzformálásánál tűnik ki. A Fourier-transzformáció a \mathcal{D} és Z terek közt egy-egyértelmű leképezést biztosít. Minden $\psi(z) \in Z$ a valós tengelyen eleme \mathcal{S} -nek ((7)-ben $y=0$).

Amellett, hogy a $Z(M_r)$ osztály esetén a kétpontfüggvények lényeges szingularitásai kezelhetőkké válnak, a lokalitás feltétele is megadható. Ugyanis pl. a zérus tömegű skalár tér teljes kommutátor függvényét nemrenormálható elméletben

$$\Delta' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varepsilon(x_0) \delta^{(n)}(x^2) \in Z(M_r)^* \quad (8)$$

alakúnak várjuk (végesszámú tag polinomiális növekedésnek felel meg impulzustérben — renormálható elmélet), ahol $\varepsilon(x_0)$ szokásos lépcsősfüggvény, (n) n -ik deriváltat jelent. Ha mármost a c_n együtthatók eleget tesznek a

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} (|c_n| (2n)!)^{1/n} = 0 \quad (9)$$

feltételnek, akkor Δ' a fénykúpra koncentrálódik [12]. A (9) feltétel sérülésekor a nemrenormálható elmélet nemlokális, mely kauzalitás sértő jelek terjedését is megengedi.

Tegyük fel az elmélet kauzális, ekkor Δ'_+ , Δ'_- Lehmann-súlyfüggvénye $|k^2| \rightarrow \infty$ -re a

$$\varrho(k^2) \leq C \exp |k^2|^\alpha, \quad \alpha < \frac{1}{2} \quad (10)$$

korláttal rendelkezik. Ugyanis közismert, hogy

$$\Delta'_F(x) = \int_0^\infty \varrho(m^2) \Delta_F(x) dm^2 \quad (11)$$

és

$$\Delta_F(x) = m H_1^{(2)}(m\xi) \cdot (2\pi^2 \xi)^{-1},$$

$$\xi = (-x^2 + i\varepsilon)^{1/2}, \quad (12)$$

ahol $H_1^{(2)}$ Hankel-függvény. Ezért (11) divergál valahányszor $\text{Re } \xi > 0$ és $m \rightarrow \infty$ -re $\varrho(m^2) \cong \exp |cm|$ és Δ'_+ , Δ'_F -nek x^2 -ben térszerű vágása fejlődik ki. Sőt, a (10) korlát érvényes, ellenkező esetben $k^2 < 0$ -ra $\varrho(k^2) \neq 0$ és a retardált függvény az előre-kúpon kívül nem tűnne el.

(10)-ből a retardált amplitúdó nagyenergiás korlátja $C \exp \varepsilon |p|$, bármilyen $\varepsilon > 0$ -ra, a kétrészecske szórás amplitúdójára pedig

$$|T(s, t)| \leq C \exp \varepsilon |s|^{1/2}, \quad |s| \rightarrow \infty. \quad (13)$$

Ezeket a korlátokat renormálható elméletben az S -mátrix unitaritása polinomiálisan redukálja, hasonló jelenségről nemrenormálható elméleteknél nem tudunk.

A Güttinger-féle analízis elsősorban a kétpont függvényekre vonatkozik, nyilvánvaló azonban, hogy nagyon jelentős egy olyan kiterjesztés, amelyben a § elején felsorolt öt tulajdonság bizonyítható. Ez először Jaffének sikerült 1967-ben [13].

3. §. Jaffe-osztályok

Jaffe térelmélete a Wightman axiómákat tételezi fel, de a tér nem mérsékelt viselkedésű, hanem általánosított függvény valamilyen $\mathcal{C}(R^4)$ függvénytéren és a lokalitást szigorúan lokalizálható terekre mondjuk ki.

Az új feltevések a következők.

1. Az impulzustér próbafüggvények a $\mathcal{D}_p(R^4)$ és $\mathcal{M}(R^4)$, $\mathcal{D}_p(R^4) \subset \mathcal{M}(R^4)$ osztályba tartoznak. A lineáris $\mathcal{M}(R^4)$ térben a konvergenciát az

$$\|f\|_{n, m, A} = \sup_{p \in R^4} g(A\|p\|^2)(1 + \|p\|^2)^n D^m f(p) \quad (14)$$

normákkal definiáljuk, ahol

$$\|p\| = (p_0^2 + p^2)^{1/2},$$

$$D^m = \frac{\partial^{|m|}}{\partial_{p_0}^{m_0} \cdots \partial_{p_3}^{m_3}}, \quad |m| = m_0 + \cdots + m_3 \quad (15)$$

és $g(t^2)$ egész függvény

$$g(t^2) = \sum_{r=0}^{\infty} c_{2r} t^{2r}, \quad c_{2r} \geq 0, \quad c_0 \neq 0. \quad (16)$$

$$\mathcal{M}(R^4) = \{f(p) \mid \|f\|_{n, m, A} < \infty \text{ minden } n, m, A\text{-ra}\}. \quad (17)$$

2. Az x -tér elkenő függvényeit $\mathcal{M}(R^4)$ Fourier-transzformációjával definiáljuk, így kapjuk az $\mathcal{C}(R^4)$ teret. A $\varphi(x)$ térrel az $\mathcal{C}(R^4)$ téren definiálunk operátort $\varphi(f)$

alakban, ahol $f(x) \in \mathcal{C}(R^4)$ és $(\Psi, \varphi(f)\Phi) \in \mathcal{C}(R^4)^*$ általánosított függvény a Hilbert tér tetszőleges Ψ, Φ állapotaira. $\varphi(f)$ a szokásos axiómákat elégítse ki, ill. a lokalitás megfogalmazása a következő:

3. A $\mathcal{C}(R^4)$ osztályból tekintjük az $\mathcal{L}(R^4) = \mathcal{C}(R^4) \cap \mathcal{D}(R^4)$ teret, feltesszük $\mathcal{L}(R^4)$ nem üres. A $\varphi_i(x)$ teret szigorúan lokalizálhatónak hívjuk, ha $\varphi_i(x), f \in \mathcal{L}(R^4)$, operátor és a lokalitást mostmár szokásosan fogalmazzuk meg:

$$\varphi_i(f) \varphi_k(g) \Psi = \pm \varphi_k(g) \varphi_i(f) \Psi \quad (18)$$

bármilyen $\Psi \in \mathcal{H}$ -ra, ahol $f, g \in \mathcal{L}(R^4)$ és térszerűen szeparált tartókkal rendelkeznek.

Természetesen akármilyen $g(t^2)$ -re $\mathcal{L}(R^4)$ nem feltétlenül nemtriviális; ahhoz, hogy legalább egyetlen függvényt találjunk $\mathcal{L}(R^4)$ -ben szükséges és elegendő [13]

$$\int_0^\infty \frac{\ln g(t^2)}{1+t^2} dt < \infty. \quad (19)$$

($f(p)$ túl gyors csökkenése tiltott.) Továbbá egyetlen elem létezése elég sok elem létezését is biztosítja.

Ha pl. $g(t^2)$ polinom, a mérsékelt disztribúció feltevését mondtuk ki, $\mathcal{C}(R^4) = \mathcal{M}(R^4) = \mathcal{L}(R^4)$, $\mathcal{L}(R^4) = \mathcal{D}(R^4)$. Szigorúan lokalizált térenél $g(s)$ lehet pl. $\alpha < \frac{1}{2}$ rendű egész függvény:

$$g(s) \leq \exp(\varepsilon s^\alpha), \quad \alpha < \frac{1}{2}, \quad \varepsilon > 0, \quad (20)$$

de $\alpha \equiv \frac{1}{2}$ rendű növekedés már nem megengedett. Megengedett pl. a

$$g(s) \leq \exp(\sqrt{s}/(\ln s)^2). \quad (21)$$

Azt látjuk tehát, hogy a nemrenormálható elméletek sokkal változatosabbak, hiszen minden tér kiválasztja a maga próbafüggvény osztályát, ill $g(t^2)$ függvényét, úgy, hogy a lokalitás is teljesüljön.

Jaffe igazi érdeme az, hogy az előző feltevések alapján a 2. §. elején felsorolt öt tulajdonság érvényességére is rámutatott.

A szigorúan lokalizált térelméletben az időrendezett szorzat vákuumértéke (propagátor) is definiálható [14]. Legyen $\varphi \in \mathcal{L}(R^4)^*$, ekkor

$$\langle 0 | \varphi(x) \varphi(y) | 0 \rangle = \int \varrho(a) \Delta_+(x-y; a) da, \quad (22)$$

ahol alkalmas $g(a)$ -val

$$\int \frac{\varrho(a)}{g(a)} da < \infty, \quad (23)$$

Tehát definiáljuk a propagátort $g(a)$ -val

$$\langle 0 | T \varphi(x) \varphi(y) | 0 \rangle_g = g(-\square) \int \frac{\varrho(a)/g(a)}{p^2 - a^2 + i\varepsilon} e^{-ipx} da dp, \quad (24)$$

ahol $g(-\square)$ az $\mathcal{C}(R^4)^*$ teret önmagára képezi le. Könnyű látni, hogy (24) két különböző g -függvénnyel felírva egy origóba eső tartójú általánosított függvényben $\in \mathcal{C}(R^4)^*$ különbözik (impulzustérben egész függvény). Gyors növekedésű ampli-

túdokat leíró elméletben a propagátorok definíciója tehát többértelmű. Nem ismert, hogy konkrét modellekben, vagy általában, milyen alapelv teszi egyértelművé a T -szorzatot.

Jaffe elméletében $f(p) \|p\| \rightarrow \infty$ -re durván $\exp(-\|p\|^\mu)$ -ként csökken, $\mu < 1$. Constantinescunak sikerült a Wightman elmélet lényeges eredményeit $\mu = 1$ -re is bizonyítani [15].

4. §. Nempolinomiális Lagrange-függvények

Az előző két §-ban megadtuk a nemrenormálható elméletek várható viselkedését, azonban előfordulhat, hogy egyes nemrenormálható elméletek voltaképpen leírhatók mérsékelt disztribúciókkal (ez minél többféle részsor aszimptotikus összegezésének kutatását sürgeti). A következőkben azzal a hittel kezdünk a nempolinomiális Lagrange-függvények tanulmányozásához, hogy aszimptotikusan legfeljebb polinomiális növekedésre vezetnek — legalábbis a fizikailag jelentősek. Ilyenek pl. 1. a csavar $SU_2 \times SU_2$ Lagrange függvény

$$\mathcal{L} = \frac{(\partial_\mu \Phi)^2}{(1 + f\Phi^2)^2}, \quad (25)$$

2. közbülső bozonos gyenge Lagrange-függvény, modellje

$$\mathcal{L}_{\text{int.}} = f \bar{Q} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) Q W_\mu,$$

Az A_μ és B Stückelberg-változókat bevezetve

$$W_\mu = A_\mu + \frac{1}{\kappa} \partial_\mu B \quad (27)$$

és

$$Q' = \exp\left(-i\gamma_5 f \frac{B}{\kappa}\right) Q, \quad (28)$$

az

$$\mathcal{L}'_{\text{int.}} = f \bar{Q}' \gamma_\mu (1 + \gamma_5) Q' A_\mu + m \bar{Q}' \left(\exp\left(i\gamma_5 \frac{f}{\kappa} B\right) - 1 \right) Q' \quad (29)$$

ekvivalens nempolinomiális alakba megy át. 3. Gravitáció Lagrange-függvénye

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\kappa^2} \sqrt{-g} g^{\mu\nu} (\Gamma_{\mu\sigma}^\lambda \Gamma_{\nu\lambda}^\sigma - \Gamma_{\mu\nu}^\lambda \Gamma_{\lambda\sigma}^\sigma), \quad (30)$$

ahol minden kifejezhető $g^{\sigma\sigma}$ -val, mint alaptérrel.

A nempolinomiális-térelméletek tanulmányozását Efimov [16] kezdeményezte, lényeges hozzájárulás származik Salam és munkatársaitól [17].

Ha a fenti Lagrange-függvényeket sorbafejtjük, leegyszerűsítve az

$$\mathcal{L}_{\text{int.}} = G \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v(n)}{n!} \Phi^n \quad (31)$$

sor jelenik meg, Φ a tér. Minthogy Φ^n $n > 4$ -re nemrenormálható, a (31) sor alakot használva sem javul a helyzet.

Létezik azonban két ekvivalens módszer azonos G^m rendű gráfok felösszegezésére, mely véges eredményt szolgáltat [16, 17]. Teljesen világos, hogy amennyiben a módszerrel a realisztikus esetben ellentmondásmentes térelméletet sikerül felépíteni (unitaritás, végeesség, csökkenő nagyenergiás hatáskeresztmetszetek stb.) lehetőség nyílik néhány paraméter segítségével a folyamatok, tömegek, stb. korrekcióit is megjósolni.

A feltevéseket egy egyszerű példán mutatjuk meg az x -tér módszer alkalmazásakor. Tekintsük az

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = : \frac{G}{1 + f\Phi} : \quad (32)$$

kölcsönhatási Lagrange-függvényt, G és f csatolási állandók, Φ spintelen semleges skalár tér, és az

$$F_{00}(x_1, x_2) = \langle 0 | T(\mathcal{L}_{\text{int}}(x_1) \mathcal{L}_{\text{int}}(x_2)) | 0 \rangle \quad (33)$$

mátrixelemet. (32)-t behelyettesítve

$$F_{00}(x_1, x_2) = G^2 \sum_{n=0}^{\infty} n! f^{2n} \Delta_F^n(x_1 - x_2). \quad (34)$$

Ez a sor nyilván divergens.

A feladat (34)-nek értelmet adni, erre a Borel-szummáció alkalmas. Tudjuk

$$n! = \int_0^{\infty} \zeta^n e^{-\zeta} d\zeta. \quad (35)$$

Tegyük ezt be (34)-be, s cseréljük fel az integrálást az összegezéssel, kapjuk

$$F_{00}(x_1, x_2) = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (1 - \zeta f^2 \Delta_F(x_1 - x_2))^{-1}. \quad (36)$$

Az integrál a fénykúpon nem szinguláris. Pl. zérus tömeg esetében

$$\Delta_F(x) = -1/4\pi^2 x^2, \quad (37)$$

$$F_{00}(x_1, x_2) = 4\pi^2 x^2 \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (4\pi^2 x^2 + \zeta f^2)^{-1}.$$

Gyakorlati szempontból F_{00} Fourier-transzformáltja jelentős:

$$\tilde{F}(p^2) = i \int_{-\infty}^{\infty} F_{00}(x_1, x_2) e^{ip(x_1 - x_2)} d^4(x_1 - x_2). \quad (38)$$

Efimov szerint (38) korrekt analitikus szerkezetét úgy kell biztosítani, hogy először a $p^2 < 0$ Symanzik-tartományra szorítkozunk, a fizikai tartományba pedig alkalmas analitikus folytatással megyünk át. Legyen $p^2 < 0$, ekkor (38)-ban az $x_0 \rightarrow ix_4$

(x_4 valós) helyettesítéssel a $(-\infty, \infty)$ integrációs kontúrt ($i\infty, -i\infty$)-be forgathatjuk. Ez a Wick-forgás definíció szerint véghezvihető:

$$\tilde{F}(p^2) = \int_{-\infty}^{\infty} d^4x e^{-iqx} F_{00}^E, \quad (39)$$

ahol q, x euklideszi vektorok, $q^2 = -p^2 > 0$, F_{00}^E euklideszi amplitúdó

$$F_{00}^E = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (1 - \zeta f^2 \Delta_F^E(x))^{-1}, \quad (40)$$

itt $\Delta_F^E(x)$ nyilván $\Delta_F(x)$ az $x^2 = -r^2 < 0$ helyen

$$\Delta_F^E(x) = \frac{m}{4\pi^2 r} K_1(mr), \quad (41)$$

K_1 Hankel-függvény. $\Delta_F^E(x)$ valós.

Végezzük el

$$d^4x = 4\pi r^3 \sin^2 \Theta dr d\Theta, \quad qx = \sqrt{-p^2} r \cos \Theta, \\ 4\pi \int_0^\pi d\Theta \sin^2 \Theta \exp(-i\sqrt{-p^2} r \cos \Theta) = 4\pi^2 \frac{J_1(r\sqrt{-p^2})}{r\sqrt{-p^2}} \quad (42)$$

segítségével (39)-ben a szögek szerinti integrálásokat:

$$\tilde{F}(p^2) = 4\pi^2 \frac{1}{q} \int_0^\infty r^2 J_1(qr) F_{00}^E dr, \quad (43)$$

J_1 Bessel-függvény. Az amplitúdó a $0 \leq p^2 \leq m^2$ tartományban (43)-ból

$$\tilde{F}(p^2) = \frac{4\pi^2}{\sqrt{p^2}} \int_0^\infty r^2 I_1(r\sqrt{p^2}) F_{00}^E dr, \quad (44)$$

ahol $I_1(x) = -iJ_1(ix)$.

Ezekbe az amplitúdókba nem írhatjuk be (40)-et, minthogy az integrandusz valós f^2 -re a $\zeta = f^{-2} \Delta_F^E(x)^{-2}$ pontban szinguláris. A korrekt F_{00}^E -t az integrációs út kellő deformálásával definiáljuk. Mivel $\tilde{F}(p^2)$ a küszöb alatt valós, kézenfekvő (41)-ben főértéket venni, ekkor $p^2 < 0$ -ra

$$\tilde{F}(p^2) = \frac{4\pi^2}{q} \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} P \int_0^\infty J_1(qr) r^2 \cdot \\ \cdot \left(1 - \zeta f^2 \frac{m}{4\pi^2 r} K_1(mr) \right)^{-1} dr. \quad (45)$$

Fontos észrevennünk a főérték választással kapcsolatos nemegyértelműséget, ugyanis

$$\left(\frac{1}{2} + ib\right) F_{00}^E(f^2 + i\varepsilon) + \left(\frac{1}{2} - ib\right) F_{00}^E(f^2 - i\varepsilon), \quad b \neq 0 \quad (46)$$

szintén valós, választható lenne. Nyilván (46) mindkét tagja közös (34) aszimptotikus sorfejtéssel rendelkezik, másszóval b szorzója eltűnő aszimptotikus kifejtéssel rendelkezik, mint pl. az $\exp[(f^2 \Delta_F^E)^{-1}]$ függvény. Valóban, Lee és Zumino megmutatták, hogy a T-szorzat definiálásának többértelműségét éppen ilyen függvény okozza [18]. A következőkben vegyük a $b=0$ „minimális” amplitúdót.

(45) véges amplitúdót definiál, mely $m=0$ -ra kiszámítható, $p^2 > 0$ tartományban $\tilde{F}(p^2)$ a korrekt szingularitásszerkezettel rendelkezik. Aszimptotikus viselkedése [19]

$$\tilde{F}(p^2) = \begin{cases} (f^2 p^2)^{-3}, & p^2 \rightarrow -\infty \\ \pm i\pi \exp(f^2 p^2), & p^2 \rightarrow \infty \pm i0. \end{cases} \quad (47)$$

Összefoglalva, a fenti módszerrel a fizikai követelményeknek eleget tevő amplitúdót definiáltunk, remélhetően G -ben felösszegezve, a nagyenergiás viselkedés ésszerűsödik. Az x -tér módszer többpont-függvényekre is kiterjeszthető.

A következő problémánk a renormálhatóság (adott G^N rendben) kritériumainak felkutatása. Itt egy tájékozódó jellegű próba áll rendelkezésre [17], amely a jól ismert hatvány-számláláson alapul. (31)-ből kiindulva könnyű felírni az S -mátrixot impulzustérben adott rendben, a kapott integrál regularitásához az impulzusfaktoroknak alkalmas kitevővel kell megjelenniük. Az alábbi szabály olvasható le: $r \rightarrow 0$ -ra legyen $\mathcal{L}_{\text{int}} \sim r^{-n}$. Ha $n > 4$, illetve $n \leq 4$, az elmélet renormálhatatlan, illetve renormálható. A szupernormális ($n < 4$) elméletek közül az $n \leq 2$ esetben minden felépő integrál véges (esetleges logaritmikus divergenciák lehetnek). A fenti kritérium érvényes polinomiális Lagrange-függvények esetén is.

n megállapítását szolgáló kiegészítő szabályok: $r \rightarrow 0$ -ra s spin esetén minden téroperátor

$$s = 0: \Phi \sim r^{-1}, \quad \partial_\mu \Phi \sim r^{-2}$$

$$s = \frac{1}{2}: \psi \sim r^{-3/2} \quad (48)$$

$$s = 1: U_\mu \sim r^{-2} \text{ (vektormezon)}, \quad r^{-1} \text{ (foton)}$$

hatvánnyal járul hozzá \mathcal{L}_{int} -hez.

Megjegyzendő, hogy néha rejtett integrálások elronthatják a fenti szabályt. A lényeg mindenképpen konkrét renormálási program kidolgozása.

Jóslatok: 1. a csavar szimmetria kölcsönhatásai normálisak, $n=4$ (l. pl. (25)), 2. (26) és (29) áttanszformálható egy normális elméletbe ($n=4$), 3. véges tömegű Yang—Mills tér is normális 4. (32) szupernormális.

5. §. Alkalmazások

1. *Martin és Taylor* [20] csavar invariáns Lagrange-függvényt használva, a perturbációs számítás második és harmadik rendjében meghatározták az izovektor és izoskálár alakfaktorok viselkedését nagy impulzusátadásnál. A Weinberg modellben a szokásos dipól-illesztéssel egyező lefutást találtak.

2. *Hunt, Koller és Shafi* [21] a $\pi\pi$ szóráshosszat vizsgálták csavar invariáns pion Lagrange-függvény esetén fagráfok + zárt hurkok feltevésével. Bár véges eredmény jött ki, a numerikus eredmények elég rosszak, feltehetően további korrekciókat kellene figyelembe venni.

3. Az alkalmazások közt kiemelkedő a gravitációs kölcsönhatás figyelembevétele. Ha (30)-at $g^{\mu\nu}$ -vel fejezzük ki, egy racionális törtfüggvényt kapunk $g^{\mu\nu} \sim r^{-1}$, $g_{\mu\nu} \sim r$, $\sqrt{-g} \sim r^2$, $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \sim r^{-1}$, ezért (30): $\mathcal{L} \sim r^{-1}$, renormálható. Skalár mezon-graviton csatolás: r^{-3} , elektron-foton-graviton kölcsönhatás r^{-3} .

Tehát a gravitáció végesítő hatással van a kölcsönhatásokra, valóban, a gravitációs tér szétkeni a fénykúpot és $1/x^2 \rightarrow 1/(x^2 + G)$, ahol G a klasszikus gravitációs potenciál állandója.

Ellenőrizzük elképzeléseinket az elektron elektromágneses tömegének kiszámításával. Modellünk [17]

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = (1 + \kappa h(x))^{-1} e \bar{\psi} \gamma_\mu A_\mu \psi, \quad (49)$$

$h(x)$ skalár gravitációs tér, κ a gravitációs állandó

$$\kappa = \left(\frac{8\pi G}{c^4} \right)^{1/2} = 2,2 \cdot 10^{-22} m_e^{-1}, \quad (50)$$

m_e az elektrontömeg. A δm saját-tömeget e^2 -rendben a szokásos elektronsajátenergiás gráf-ból kell kiszámítani, de a (33) alatti propagátor is belső vonalként tekintendő. (37)-et helyettesítve

$$\frac{\delta m}{m_e} = e^2 \int \frac{e^{-\zeta} d^4 x d\zeta}{x^2 + \kappa^2 \zeta}, \quad (51)$$

ahonnan

$$\frac{\delta m}{m_e} = \frac{G\alpha}{4\pi} \ln \frac{4\pi}{m_e \kappa} \approx \frac{2}{11}. \quad (52)$$

Lényeges eredményre jutottunk: végtelen sok graviton cseréje e^2 rendben a saját-tömeget végesíti. Ugyancsak az (52) összefüggést kapjuk realisztikus gravitáció esetén is [22].

A saját-tömeg a teljes tömeg egy része. Elképzelhető, hogy a további korrekciók δm -et felnövelik. Ha azonban $\delta m = m_e$, a gravitáció és elektromágnesség többé nem független jelenségek.

Ezek az eredmények, a kezdetleges számítási technika és feltevések ellenére is figyelemre méltóak, és a nempolinomiális elméletek további vizsgálatára ösztönöznek.

IRODALOM

1. Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 419, 1965.
2. Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 431, 1965.
3. Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 14, 1, 1966.
4. Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 15, 377, 1967.
5. Pócsik Gy., Kvantumtérelmélet és diszperziós relációk, Egyetemi jegyzet, Tankönyvkiadó, Budapest 1970.
6. S. Gasirowicz és D. A. Geffen, Argonne preprint, 1968.
7. R. J. Eden, P. V. Landshoff, D. I. Olive és J. C. Polkinghorne: The Analytic S-matrix, Cambridge, 1966.
8. D. Ruelle, Helv. Phys. Acta, 35, 34, 1962.
9. J. Bros, H. Epstein és V. Glaser, Nuovo Cimento, 31, 1265, 1965; Comm. Math. Phys. 1, 240, 1965.
10. K. Hepp, Helv. Phys. Acta, 37, 639, 1964.
11. Pócsik Gy., Nuovo Cimento, 34, 287, 1964; Nucl. Phys. 67, 673, 1965.
12. W. Güttinger, Fortsch. der Phys. 14, 483, 1966.
13. A. M. Jaffe, Phys. Rev. 158, 1454, 1967.
14. A. M. Jaffe, Proc. Informal Meeting on Renormalization Theory, IC/69/121, 1969.
15. F. Constantinescu, I. [14].
16. G. V. Efimov, JETP, 17, 1417, 1963.
E. S. Fradkin, Nucl. Phys. 49, 624, 1963.
17. A. Salam és mtsi, ICTP-preprintek, 1969 és 1970.
18. B. W. Lee és B. Zumino, CERN-preprint, 1969.
19. A. Salam és J. Strathdee, preprint IC/69/120, 1969.
20. T. P. Martin és J. G. Taylor, Nucl. Phys. B24, 365, 1970.
21. A. P. Hunt, K. Koller és Q. Shafi, preprint ICTP/69/19, 1970.
22. C. J. Isham, A. Salam és J. Strathdee, preprint IC/70/131, 1970.

A SZILÁRDTESTFIZIKA FEJLŐDÉSÉNEK VÁRHATÓ IRÁNYAI

*A Magyar Tudományos Akadémia Matematikai és Fizikai
és a Műszaki Tudományok Osztálya által
1970 novemberében rendezett tudományos ülészen
elhangzott előadások*

FÉM-FÉLVEZETŐ ÁTALAKULÁS JELENSÉGE ÉS IDŐSZERŰ PROBLÉMÁI

BELEZNAY FERENC

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Az átmeneti fém vegyületekben gyakran fellépő fém-nemfém átalakulás jelenségét, valószínű elméleti magyarázatát és a legfontosabb kísérleti eredményeket ismertetjük. Kitérünk a jelenség gyakorlati hasznának, és a hasznosítás során fellépő problémáknak az ismertetésére is.

Bevezetés

Fém-nemfém, M-I, félvezető-fém, fém-szigetelő átalakulásnak nevezzük azt a jelenséget, hogy egyes anyagok jellegzetesen fémes tulajdonságai ugrásszerűen félvezető, szigetelő tulajdonságokra változnak, ha az anyag felépítésére vagy állapotára jellemző valamely paraméter értéke megváltozik. Legszembeszökőbbben az anyag vezetőképessége változhat meg, nem ritka több, akár 7 nagyságrend értékű változás az anyag fajlagos ellenállásában.

Ilyenféle átalakulást találunk fémek ammóniás oldatában, az oldott fém koncentrációjának a változásakor, higany gőzében a gőznyomás függvényében, félvezető anyagokban az elektromosan aktív szennyező atomok koncentrációjának a változásakor, esetleg egyes félfémekben alacsony hőmérsékleten és a második oszlopba tartozó alkáli földfémekben nyomás hatására. Végül igen nagy számban átmeneti fémek oxidjaiban, szulfidjaiban, és talán egyéb vegyületeiben. Ez utóbbi anyagokban az átalakulást a hőmérséklet változása hozza létre, így természetesnek látszik a jelenség hasznosítása rendkívül egyszerű felépítésű hőmérséklet szabályozókban, hőre érzékeny kapcsolókban. Túl ezen és számos egyéb fontos felhasználási lehetőségen, a jelenség vizsgálata a fizikus számára önmagában is érdekes, mert segítségével az egyes anyagok felépítéséről, bennük az elektronok mozgásáról és a fellépő fázisátalakulások természetéről igen sokat megtudhatunk.

Az M-I átalakulások rendszeres vizsgálata a 60-as években indult meg. Számos elmélet született az átalakulás okának és tulajdonságainak a magyarázatára. Ma már valószínű, hogy nincsen olyan elmélet, amely a különféle körülmények között létrejövő átalakulásokat egységesen leírná. Mégis, legalábbis az átmeneti fémek esetében

úgy tűnik, hogy kétféle magyarázat képes az átalakulás létrejöttét és a keletkező két fázis tulajdonságait megmagyarázni. Ezt a két elméletet szeretnénk röviden ismertetni és a legfontosabb kísérleti eredményeket.

Ebben a rövid összefoglalóban kizárólag az átmeneti fémek vegyületeivel fogunk foglalkozni. Feltehetően ezeknek a vizsgálata vezet majd a legtöbb használható eredményre, mert itt az átalakulást a hőmérséklet változása hozza létre, egyes anyagokban az átalakulás gyakorlatban jól használható hőmérséklet értéken van, és olyan gyakori az átalakulás ezeknek az anyagoknak a körében, hogy valószínűleg sikerül majd az átalakulásért felelős elektron- vagy kristály-szerkezeti sajátságokat felismerni és újabb anyagok kereséskor hasznosítani.

Az ismertetés során teljességre nem törekszünk, inkább azt szeretnénk a kiválasztott példákon megmutatni, hogy mennyire a kezdetén áll ezeknek az átalakulásoknak a kutatása, és milyen feladatok állnak az újabb kísérleti és elméleti vizsgálatok előtt.

Elméleti modellek az M-I átalakulásra Mott-átalakulás

Az elektronok korrelált mozgását használja fel Mott elmélete (1949) [1]. Megértéséhez tudni kell, hogy az elektron-gázba tett bármely töltés hatására az elektronok úgy mozdulnak el, hogy a töltést leárnyékolják, pl. a pozitív töltésségységek Coulomb potenciálja:

$$-\frac{e^2}{r}$$

úgy módosul, hogy a tényleges potenciál

$$-\frac{e^2}{r} \cdot \exp(-qr)$$

alakú lesz. Itt q a leárnyékolási hossz, Thomas—Fermi közelítésben:

$$q^2 = 4m \cdot e^2 (3 \cdot N/\pi)^{1/3} / \hbar^2$$

ahol N az elektronok sűrűsége, m a tömegük \hbar a Planck állandó $(2\pi)^{-1}$ -szerese. Mott kiszámolta, hogy ebben a potenciálban az alapállapot energiája, az elektronok kötési energiája mekkora lesz. Az adódott, hogy a kötési energia függ a q értékétől, vagyis az elektronok koncentrációjától; ha az

$$N^{1/3} \cdot a_H \gtrsim 0,2$$

egyenlőtlenség teljesül (itt a_H a Bohr sugár), akkor kötött állapot már nem jöhet létre. Bár a kristályt alkotó atomok atomtörzsének a potenciálja nem az egyszerű Coulomb potenciál, a leárnyékolás az elektronok által itt is hasonlóan végbemegy. De így az elektronok az atomtörzsekhez csak bizonyos koncentráció alatt, vagy ami ezzel lényegében egyenértékű, csak bizonyos atomtávolságok felett lehetnek kötve — ennél nagyobb koncentrációk, kisebb atomtávolságok esetén az elektronok szabaddá válnak; az anyag vezetővé válik.

Hogy véges hőmérsékleten a szabad elektronok koncentrációja a kötési energia zérussá válásával miért nem nő folyamatosan, azt ez az elemi meggondolás nem

magyarázza meg. Ha a gerjesztés energiája függ a töltéshordozók koncentrációjától, és ezt a függést, mint esetünkben ismerjük, akkor a rendszer szabad energiáját ki tudjuk számolni. Ennek a számolásnak az eredménye azt mutatja, hogy az elektronok száma valóban ugrásszerűen változik, M-I átalakulás jön létre, és ez az átalakulás elsőrendű lesz.

Úgy tűnik, hogy az ismertetett esetek egy részében a Mott által javasolt mechanizmus hozza létre az átalakulást. Ezért, és történeti okokból is, szokás ezt a jelenséget még Mott-átalakulásnak (Mott-transition) is nevezni.

A sávszerkezet tulajdonságain alapuló elméletek

Az elméletek egy másik csoportja csak a szilárd anyagokban létrejövő átalakulásokkal foglalkozik, és a sávszerkezet tulajdonságait használja fel. Tekintve, hogy a szilárd anyagok elektronszerkezetének néhány speciális tulajdonsága is fontossá válik ezekben az elméletekben, a legfontosabb tudnivalókat röviden összefoglaljuk.

Az anyagok atomjaiban az elektronok diszkrét energiájú állapotokban foglalnak helyet. Ha ezeket az atomokat a szilárd anyagban kristályos rendbe összerakjuk, az egyes atomi állapotok a többi atom hatására perturbálódnak.

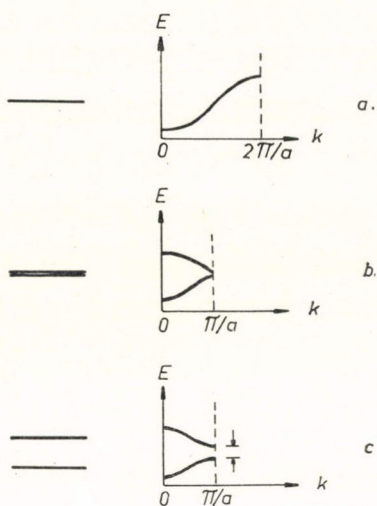
Az igen nagy mértékben degenerált atomi nívók sávokká szélesednek, az egyes sávokban az állapotok száma megegyezik az eredeti nívók, vagyis a kristályban egyenértékű helyen levő atomok számával. A továbbiak csak a leggyengébben kötött, külső vegyérték elektronokról beszélünk; a belső, törzs-elektronokat a többi atom lényegében változatlanul hagyja.

A többi atom hatására az elektron képes a helyét megváltoztatni; az alapállapotát többé nem az atomhoz való tartozás, hanem a mozgási állapota, a hullámszáma határozza meg. Egyetlen különbség a szabadon mozgó elektronhoz képest, hogy a hullámszám értéke korlátozott, az első Brillouin-zónába esik. Az 1. a. ábrán látható az energia-hullámszám függés, a sávszerkezet a k hullámszám vektor önkényesen kiválasztott iránya mentén. A Brillouin-zóna kiterjedése fordítva arányos a kristályban található legkisebb periodikusan ismétlődő egység (az elemi cella) kiterjedésével: így kétszer akkora elemi cellához fele akkora Brillouin zóna tartozik.

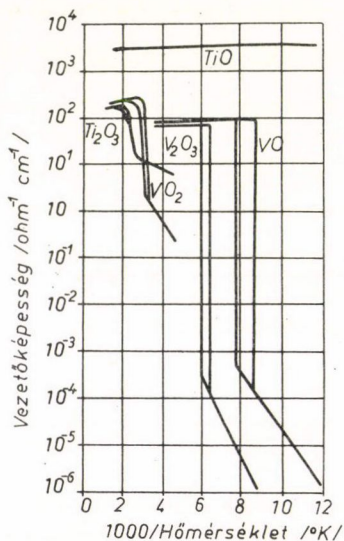
A sávok egymáshoz viszonyított helyzete alapján sikerült *Wilsonnak* 1931-ben a különféle anyagokat osztályoznia. Mivel minden sávban annyi elektron állapot van ahány elemi cella a kristályban található, és az elektronok kétféle spin állása miatt az állapotok száma megkétszereződik, át nem lapoló sávok esetében a sávok félig vagy egészen lesznek töltve, illetőleg üresek lesznek. Fémek tulajdonságát azok az anyagok mutatnak, amelyekben a legfelső, elektronokat tartalmazó sáv nem lesz teljesen betöltve; szigetelő (félvezető) az az anyag lesz, amelyben a legfelső, teljesen betöltött sávot a legalsó, teljesen üres sávtól véges tilos sáv választ el.

Miképpen jöhet létre tehát M-I átalakulás? Úgy, ha a sávszerkezet olyan módon változik meg, hogy fémek tulajdonságából szigetelő sajátosságú lesz. Ha például egy félig betöltött sáv valami miatt „kettéhasad”, akkor egy teljesen üres és egy teli sáv keletkezik. Az eddigiek alapján ilyen felhasadást eredményezhet, ha a sávot létrehozó atomi nívók felét olyan perturbáció éri, hogy a hatására felhasadó atomi nívókból keletkező sávok többé nem lapolják át egymást.

Ilyen lehetséges perturbációt talált *Slater* (1951) [2], aki megmutatta, hogy ha az egymás mellett álló elemi cellákban a spinek antiferromágnesesen rendeződnek,



1. ábra. Energia-hullámszám függés
1. a. Az eredeti Brillouin zónában
1. b. A redukált B. z.-ban
1. c. A redukált B. z.-ban, nagy kicserélődési kölcsönhatás esetén



2. ábra. A fajlagos vezetőképesség hőmérséklet függése átmeneti fém oxidokban

akkor az elemi cella megkétszereződik (így a Brillouin-zóna fele akkora lesz) és a kicserélődési kölcsönhatás a sávokat felhasítja. Ha a kicserélődési kölcsönhatás kicsiny, az 1. a. ábrán látható sávszerkezet az 1. b. alakúra módosul, ha nagy, úgy az 1. c. eset állhat elő. Ugyanilyen hatása lehet az atomok elmozdulásának, a kristályszerkezet változásának is, (Brooks és Adler (1967) [3]) feltéve, hogy a változás a rács eredeti szimmetriáját csökkenti.

Természetesen az itt elmondottak csak a magyarázat lényegét tartalmazzák. Számos többé vagy kevésbé magától értetődő következménye van ezeknek az egyszerű elméleteknek. Ilyen például, hogy ha az átalakulást az antiferromágneses rendeződés hozza létre, akkor az átalakulás hőmérséklete egybe kell hogy essék a Néel hőmérséklettel. Vagy ha rácsstorzulás, akkor a torzulás mértékéből, és a $T=0^\circ\text{K}$ -en mért tilos sáv sáv szélességéből az átalakulás hőmérséklete megjósolható. A rácsstorzulás mértéke, így a tilos sáv is a töltéshordozók gerjesztésével csökken, ez ugyanúgy, mint a Mott-átalakulás esetében, a gerjesztett töltéshordozók számának ugrásszerű változására, első fajú fázis-átalakulásra vezet.

Kísérleti vizsgálatok

A kísérletek elsődleges célja az átalakulás természetének és a keletkező fázisok tulajdonságainak a vizsgálata. A vezetőképesség, galvanomágneses és termoelektromos mérések a két fázis töltéshordozóinak a számát, mozgásuk törvényeit, és az átalakulás során a koncentráció változását határozzák meg. A 2. ábrán látható Morin úttörő vezetőképesség mérése (1956) [4], amelyben a vanádium oxidjaiban az átalakulást megtalálta. Ilyen mérésekkel számos átmeneti fém vegyületben található a hőmérséklettől függő M-I átalakulás. Az 1. táblázat tartalmazza ezeket az anyagokat, feltüntetve az átalakulás hőmérsékletét is. Ezt a táblázatot Adler összefoglaló dolgozata alapján [5] állítottuk össze, a táblázatban található valószínű okok az 1968-as helyzetet tükrözik.

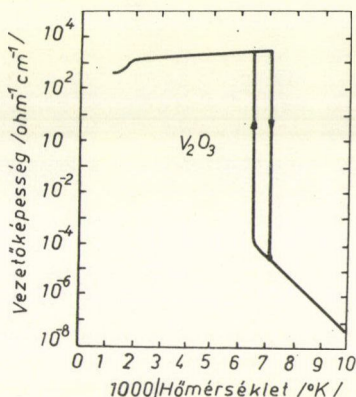
Természetesen az egyszerű transzport jelenségek mérése nem elégséges az átalakulás részletes vizsgálatára. A szokásos mérések közül a fajhő és a D.T.A. mérések az átalakulás termodinamikai jellemzésére szolgálnak. Az esetleges kristály struktúra változásokat, amelyek igen elterjedtek ezeknek az anyagoknak a körében,

1. TÁBLÁZAT

Anyag	Az átalakulás hőmérséklete	Az átalakulás valószínű oka
VO ₂	340° K	Kristály struktúra változás
NbO ₂	1070° K	
CrS	600° K	
FeS	430° K	
Ti ₃ O ₅	460° K	
V ₃ O ₅	150° K	
V ₄ O ₇	130° K	
NiS	264° K	Antiferromágneses rendeződés
Ti ₂ O ₃	450° K	
Ti ₅ O ₉	130° K	
VS	100° K	
V ₂ O ₃	150° K	Antiferromágneses rendeződés és struktúra változás együtt
VO	126° K	
V ₆ O ₁₃	149° K	
Fe ₃ O ₄	119° K	
		Mott-átalakulás

röntgen diffrakciós vizsgálatokkal, a mágneses rendeződést szuszceptibilitás mérésekkel és neutron szórási kísérletekkel szokás meghatározni. A lokális momentumokat NMR és Mössbauer mérésekkel, az elektron állapotok spektrumát optikai mérésekkel lehet vizsgálni. Ezeknek a vizsgálatoknak a részletes leírása helyett, amelyet az összefoglaló terjedelme sem engedne meg, szabadjon egy látványos mérés-sorozatot ismertetni, amely jól mutatja, hogy milyen komplex vizsgálat szükséges akár egyetlen anyag jellemzésére is.

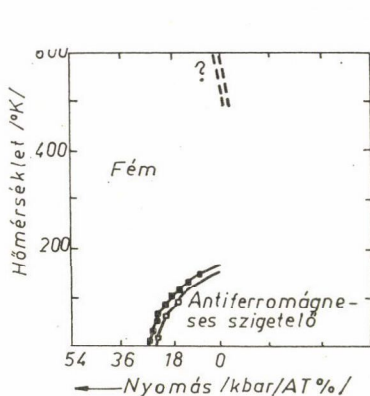
A mérés, amelyet ismertetünk, *Remeika* és munkatársainak a munkája [6], [7], amelyet 1969-ben és 1970-ben publikáltak, és amelyben a V₂O₃ M-I átalakulását tanulmányozták. Egyszerűbb hivatkozás kedvéért a V₂O₃ vezetőképességének hőmérséklet függését külön is megadtuk a 3. ábrán. Az 1. táblázatban ez az anyag úgy szerepel, hogy benne a szigetelő fázis kialakulásáért az antiferromágneses rendeződés a felelős. Antiferromágneses rendeződés azonban nem mond ellent Mott elméletének sem. Mindkét elmélet szerint az átalakulás hőmérséklete kell hogy függjön a nyomástól, az első dolgozatban a szerzők ezt a nyomásfüggést vizsgálták. A 4. ábrán látható a mérés eredménye. A kísérleti eredmények ésszerűen beleillenek mind a kétféle értelmezésbe, sajnos az elmélet még nem áll olyan helyzetben, hogy a pontos, számszerű értékek dönthetnének egyik vagy másik modell javára.



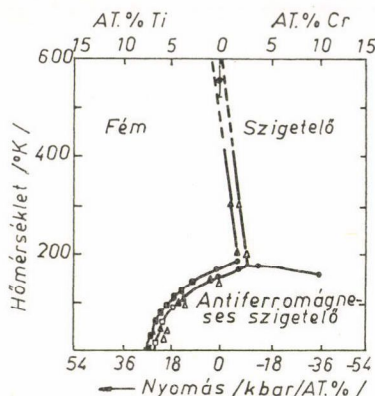
3. ábra. Fajlagos vezetőképesség hőmérséklet függése V₂O₃-ban

Az igazán érdekes eredmény az volt, hogy a $T = 150^\circ \text{K}$ -en létrejövő átalakuláson kívül az előzőleg nem nagyon vizsgált magas hőmérsékletű anomália a nyomás alkalmazásával rendkívül gyorsan eltűnt. Ha ez egy fordított sorrendű M-I átalakulást jelzett, akkor a viselkedése pontosan megfelel annak, amit Mott elmélete alapján várni lehet.

Sajnos, hogy ezt az anomáliát részletesen vizsgálni lehessen, negatív nyomást kellene alkalmazni, hogy az átalakulás alacsonyabb hőmérsékleten menjen végbe. Ez nyilvánvalóan lehetetlen, lehetséges azonban olyan szennyező atomokat juttatni a kristályba, amelyek a rácsot fellazítják, hatásuk pontosan ellenkező a nyomás alkalmazásának. Ilyen célra a Cr bizonyult alkalmasnak, igen kis mennyiségű Cr atom (0–10 atom%) bejuttatása a rácsállandót a kívánt módon megnöveli.



4. ábra. V_2O_3 átalakulási hőmérsékletének nyomásfüggése



5. ábra. Az átalakulási hőmérséklet nyomásfüggése Cr-al és Ti-al szennyezett V_2O_3 -ban

Az 5. ábrán látható a szennyezett mintákban az átalakulás hőmérsékletének a nyomástól való függése. Az eredeti 4. ábrával való pontos egyezés, a strukturális vizsgálatokon túl, azt bizonyítja, hogy a szennyezők valóban a „negatív nyomás” hatását keltik. Az ilyen anyagokban mért nyomás függés valóban kimutatja, hogy a magas hőmérsékletű anomália alacsonyabb hőmérsékleten Mott-átalakulás lesz; a vezetőképesség, szuszceptibilitás és az azóta elvégzett Mössbauer mérések mind ezt igazolják.

A kísérlet fő értéke, hogy megmutatja: az átalakulás több hatás eredménye is lehet. Az alacsonyabb hőmérsékleten végbemenő átalakulás is lényegében Mott-átalakulás, amelyet az antiferromágneses rendeződés, és az ezzel járó magnetosztrikciós eredetű rácsorzulás elősegít az eredeti koncentráció és hőmérséklet tartományon kívül is kialakulni. A további kísérleti és elméleti munka feladata ilyen minőségű mérések tervezése és végrehajtása, és az eredmények kvantitatív kiértékelése, a modellekkel való számszerű összehasonlítása kell, hogy legyen.

Végül, de nem utolsósorban, szeretnénk pár szót az alkalmazások számára fontos eredményekről is szólni. Ha nem is elvi, de gyakorlati szempontból rendkívül fontos az anyagok minőségi javulása. Ezt a VO_2 esetében mérhetjük le igen könnyen.

A 2. ábrán látható mérésben az ellenállás ugrás ebben az anyagban 2 nagyságrend volt. Ma már ismeretes olyan mérés, ahol ez az ugrás 6 nagyságrendet elér. Nyilvánvalóan az egyre tökéletesebb egykristályok előállítása ezt még növelni is fogja.

Sajnos, az egykristályok eszköz készítésre alkalmatlanoknak látszanak. Ismét a VO_2 esetét vizsgálva példaként, ahol az átalakulás hőmérséklete igen jól használható hőmérséklet értéken van, az anyag az átalakulás során olyan nagy mértékben deformálódik, hogy a kristály néhány ciklus után megrepedezik, szétporlad. Szerencsére az anyag vékonyréteg formájában és egyéb oxidokkal színterelt mikrokristályos állapotban is mutatja az átalakulást, sőt, az átalakulás hőmérséklete, csakúgy mint a V_2O_3 esetében, különböző szennyező atomok segítségével akár 50°C -al is megváltoztatható. Ezek az eredmények azzal biztatnak, hogy valóban lehetséges lesz a jelenség hasznosítása újszerű eszközök formájában.

Szeretném az Akadémia III. osztályának megköszönni, hogy lehetőséget adott ennek az összeállításnak az elkészítésére. Remélem, hazánkban is lehetőség nyílik ilyen irányú kutatás folytatására; a feladat a kutatók számára izgalmas és nem kevésbé fontos annak az eldöntése is, hogy a jelenség annyira hasznos is lesz, mint azt ma gondoljuk.

IRODALOM

1. N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. London, A62, 416, 1949.
2. J. C. Slater, Phys. Rev. 82, 538, 1951.
3. D. Adler és H. Brooks, Phys. Rev. 155, 826, 1967.
4. F. J. Morin, Bell Syst. Tech. J. 37, 1047, 1958.
5. D. Adler, Rev. Mod. Phys. 40, 714, 1968.
6. D. B. McWhan, T. M. Rice, és J. P. Remeika, Phys. Rev. Letter, 23, 1384, 1969.
7. G. K. Wertheim, J. P. Remeika, H. J. Guggenheim, és D. N. E. Buchanan, 25, 94, 1970

ION-IMPLANTÁLT SZENNYEZÉSEK SZILÁRD TESTEKBE

MEZEI FERENC

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A dolgozatban rövid ismertetést adunk az ion-implantáció során lezajló atomi folyamatokról, az ion-implantációs mikroötvözési eljárás fő jellemzőiről, eddigi fontosabb alkalmazási területeiről, valamint az ilyen irányú kutatások jelenlegi helyzetéről.

Bevezetés

Az ion-implantáció olyan kutatási terület, amelyen Magyarországon nem folyik kutatómunka, ugyanakkor sok más országban igen intenzíven művelik. Ez a tény felveti azt a kérdést, hogy hátrányos következményekkel kell-e számolnunk, ha az ilyen irányú kutatásokat nem indítjuk meg, amíg talán nem késő. A jelen dolgozat célja, hogy az eddigi ion-implantációs kutatások rövid áttekintésével igyekezzünk választ találni erre a kérdésre.

Az I. fejezetben az ion-implantációval kapcsolatos jelenségekört tekintjük át, majd a II. fejezetben az ion-implantációs ötvözési technika fő jellemvonásait vizsgáljuk; a III. fejezetben pedig e technika eddig már megvalósított vagy konkrét formában felvetett alkalmazásait soroljuk fel; a IV. fejezetben az ion-implantációs kutatások jelenlegi helyzetéről adunk rövid jellemzést.

I. Nagyenergiájú ionok ütközése szilárd testekbe

Az ion-implantáció tulajdonképpen egy sokat vizsgált jelenségkör kontrolált alkalmazása szilárd halmazállapotú anyagok mikroötvözésére. A szóban forgó jelenségkör: felgyorsított ionok szilárd-testekbe való ütközése és lefékeződése során lezajló folyamatok. Ezeket a problémákat elsősorban az elektromágneses izotópszeparálás kapcsán kezdték vizsgálni főleg az utolsó 10 évben. Maga az ion-implantáció ezekből a kutatásokból nőtt ki és ma már külön, saját speciális problémákkal is rendelkező területnek tekinthető.

Nagy energiákra (2 keV—2 MeV) felgyorsított ionok szilárd testekbe való ütközésének alapvető mechanizmusa az, hogy az ionok egyes atomokkal való ütközések sorozata folyamán lelassulnak, energiájukat átadják az ütközésekben résztvevő atomoknak, és végül lefékeződve beépülnek a target anyagába. A behatoló ion által meglökött atomok energiája újabb ütközések sorozatával oszlik el a céltárgy atomjai közt. Egy ion behatolása során tipikusan néhány ezer atom lökődik meg (többségük közvetett ütközések során) annyira, hogy elmozdulásuk a hőmérsékleti rezgések amplitúdóját jelentősen meghaladja. Nyilvánvaló tehát, hogy egy szilárd test ionokkal való bombázásának csak egyik eredménye az ionok behatolása és beépülése a céltárgyba, míg másik következményként a target szerkezete is jelentősen megváltozik az ionok által érintett tartományban. Ezek a változások a sugár-

zási károsodás, illetve a sputtering (porlasztás) jelenségeként ismeretesek. A következőkben sorban fogjuk vizsgálni ezeket a részfolyamatokat.

A gyors ionok lefékeződése a jelzett energiatartományban döntő módon a rugalmas ütközések útján történik. Az ionok és atomok kölcsönhatásában az alacsonyabb energiáknál az atommagok törzselektronok által árnyékolt Coulomb tasztításáé a fő szerep, magasabb energiáknál viszont egyre fontosabbá válnak az ún. elektron-ütközések, amelyek a törzselektronok állapotának megváltoztatásával (kicszerélődés, leszakadás) járó folyamatokat jelentik. Az utóbbi 10 évben lefolytatott elméleti és kísérleti kutatások [1] eredményeként jelenleg már kielégítő pontossággal számot lehet adni az ionok ütközésének és lefékeződésének folyamatáról. A vizsgálatok azt mutatják, hogy lényeges különbség van az ionok kristályos és amorf anyagokba való behatolása között. Amorf anyagokban a teljesen rendszeretlenül egymást követő ütközések során az ionok zezugos pályán haladva kezdeti energiájukkal durván arányos átlagos mélységben állnak meg. A behatolás mélysége azonban az egyes ionokra a véletlenszerű ütközések miatt igen különböző lehet, így belőtt ionok mélységleoszlása igen erősen elmosódott az átlagos behatolási mélység körül, amely 100 keV-os ionokra általában 0.1 és $1\ \mu$ között van [2]. Kristályos anyagokban a behatolás mélysége még az ionnyaláb irányától is függ. Kis indexű kristálytani irányokban, azaz a kristályrácsban közeli atomok által alkotott atomsorokkal tipikusan $1\text{--}2^\circ$ pontossággal párhuzamosan érkező ionok jelentős része általában egy nagyságrenddel mélyebben hatol a céltárgyba [4], mint a véletlenszerű irányból érkező ionok, amely utóbbiak lefékeződése az amorf anyagokban lezajló folyamathoz hasonlóan megy végbe. Ez az effektus channelling (csatorna-effektus) néven ismert és 1963-ban számológépen szimulált ion-ütközésekben fedezték fel először [3]. A jelenség magyarázata az, hogy azok az ionok, amelyek a kristály felületére az atomsorok között esnek be, súroló ütközések révén benne maradnak a párhuzamos atomsorok által képzett csatornában és így lefékeződésük során nem szenvednek nagy energialeadással járó, szemtől-szembe jellegű ütközéseket.

Ugyanígy lényeges különbség van amorf és kristályos anyagok által elszenvedett sugárzási károsodás között is. Pontosabban ez a jelenség elsősorban kristályos anyagok esetén jelentős, mégpedig a behatoló ionok ütközései során egyes atomok helyükről való kilökése a kristályszerkezet sérülését jelenti, amelyek sok esetben a felületi rétegek amorfíá válásához vezethet. A besugárzott anyagokban keletkező kristályhibák fajtáival és viselkedésével igen sokat foglalkoztak, például reaktorok szerkezeti anyagainak kiválasztása céljából is. Az ion-implantáció szempontjából leglényegesebb tulajdonságok a következők [5]: A károsult zóna mélysége valamivel kisebb, mint az ionok behatolási mélysége, akkor is, ha channelling nem lép fel. Így a belőtt ionok jó része viszonylag sértetlen környezetben áll meg, nem is beszélve a csatorna effektus révén anomálisan mélyre hatoló ionokról. A sugárzási károsodás kitemperálása általában olyan, viszonylag alacsony hőmérsékleteken elvégezhető, amelyeken a belőtt ionok diffúziója nem indul meg. A kristályos szerkezet egyik érdekes következménye az, hogy egyes atomsorokban létrejöhetnek olyan fókuszált ütközéssorozatok, amelyek során ionok által egy ütközésben leadott impulzus a meglökött atomról az atomsor mentén tovább adódik, és az eredeti ütközéstől jelentős (akár $50\text{--}70\ \text{\AA}$ -os) távolságban keletkezik valamilyen rácshiba.

A sputtering jelensége azt jelenti, hogy egy-egy nagyenergiájú ion becsapódásakor a céltárgy felületéről, anyagi minőségétől függően, de az adott tartományban energiától lényegében függetlenül, tipikusan $1\text{--}10$ atom leszakad. A jelenség ma-

gyarázatát abban találták meg, hogy a sorozatos ütközések révén egyes felülethez közel eső atomok elegendően nagy, az anyagból kifelé irányuló sebességre tesznek szert. Kristályos anyagokban fontos szerepet játszanak az említett fókuszált ütközési sorozatok, amelyek révén még a target felületétől mért sok atomtávolságnyi mélységben lezajló ütközések is vezethetnek felületi atom kilökődéséhez. A becsapódó ionok következtében fellépő lokális felmelegedés, az anyag emiatti párolgása viszont általában nem jelentős [6].

II. Ion-implantációs mikroötvözés

A fentiekből látszik, hogy felgyorsított ionokkal való bombázás alkalmas arra, hogy a céltárgy vékony felületi rétegét ($0.1\text{--}10\ \mu$) a benne lefékeződő ionok révén ötvözzük. Az eljárás elsősorban kis koncentrációjú ötvözők, ún. szennyezések bevitelére alkalmas, mivel nagy koncentráció elérését a sputtering következtében fellépő anyagvesztés általánosan gátolja, másrészt pedig erősebb besugárzás esetén a sugárzási károsodás oly mértékű lehet, hogy kielégítő kitemperálása mellékhatások nélkül már nem lehetséges. Ion-implantációs mikroötvözési eljárásnál tehát az ötvöző elem kémiai beviteléről és a fizikai mellékhatások (sugárzási károsodás) szerepének minimumra csökkentéséről van szó. Az első implantációs kísérleteket *Russel Ohl* végezte 1951-ben a Bell Telephon Laboratóriumban [7]. Si pontkontaktusok készítéséhez használt ion besugárzást, mai ismereteink szerint azonban ez nem volt tényleges implantáció, mivel a döntő szerepet a sugárzási károsodás játszotta. A mai értelemben vett ion-implantációs eljárásra *W. Shockley* nyújtott be szabadalmat már 1954-ben [8]. A kiterjedt kutatás ezen a területen azonban csak a 60-as években indult meg.

Ellentétben a többi, valamilyen hőmérsékleten egyensúlyi állapot beállítására irányuló folyamatokat (oldás, diffúzió) hasznosító eljárással, az ion-implantációs ötvözési technika fő jellemvonása az, hogy nem egyensúlyi folyamat. Ezért az ion-implantáció gyakorlatilag független a termodinamikai egyensúlyok által megszabott kötöttségektől, lényegében minden anyag minden anyaggal való ötvözésére alkalmas, az egyensúlyi oldódási feltételek által megszabott határoknál sokkal nagyobb koncentrációk esetén is. A nem egyensúlyi jelleg másik fontos következménye, hogy az implantáció körülményei, elsősorban a target hőmérséklete széles határok között változhat, és az egyensúlyi folyamatok szempontjából nézve igen alacsony érték (pl. szobahőmérséklet) lehet. Így az ötvözés közben más eljárásoknál gyakran fellépő nem kívánatos folyamatok (pl. korábban bevitt szennyezések diffúziója, alapanyag bomlása, stb.) elkerülhetők. Ugyancsak lényeges, hogy implantálással geometriailag igen jól definiált és széles határok közt változtatható alakú és profilú ötvözött tartományok hozhatók létre. Az eljárás fontos jellemvonása a tisztaság is; a spektroszkópiai tisztaságú ionnyaláb mellett egyéb szennyezések, pl. olyan felületi védőréteggel távoltarthatók, amelyen a nagyenergiájú ionok viszont könnyen áthatolnak.

Az ion-implantációs ötvözési technika fontos részét képezik azok a módszerek, amelyekkel a bevitt szennyezések koncentrációjának eloszlását és az alapanyag kristályában elfoglalt pozícióját lehet meghatározni. Mivel igen vékony rétegek kis mértékű ötvözéséről van szó, így olyan kis anyagmennyiségeket kell meghatározni ($10^{11}\text{--}10^{16}$ atom/cm²) amelyekre a hagyományos eljárások már nem alkalmazha-

tók. A legfontosabb vizsgálati módszerek technikailag magához az ion-implantációhoz nagyon hasonlóak. Általában könnyű ionokból (többnyire protonokból, vagy α -részekből) álló, nagyenergiájú szondázó ionnyalábot bocsátanak a vizsgálandó anyagra, és a behatoló könnyű ionok, valamint az implantációval bevitt atomok valamilyen jellemző kölcsönhatását figyelik (pl. specifikus magreakció, Rutherford-szórás, karakterisztikus röntgensugárzás gerjesztése, stb.). A szondázó ionok behatolásuk során ismert módon lassulnak, ami lehetőséget nyújt annak megállapítására, hogy a kölcsönhatás milyen mélységben következett be. Így az implantált atomok mélységeloszlása is igen jó pontossággal mérhető. Továbbá felhasználva azt a tényt, hogy a szondázó ionok behatolása is történhet a csatorna-effektus révén, megállapítható az is, hogy az implantált szennyezések a szondázó ionok által erősebben átjárt csatornáknak, azaz intersticiális helyeken, vagy pedig a szondázó ionok elől jobban takart atomsorokban, azaz szubsztitúciós helyeken vannak-e. Ezek az analízis eljárások igen sok változatban ismeretesek, és az utóbbi 2–3 évben olyan fejlettségre tettek szert, hogy az implantált ionok elhelyezkedésére vonatkozó minden lényeges információ megszervezésére módot nyújtanak [9].

Még egyszer hangsúlyoznunk kell, hogy az ion-implantációs ötvöztési eljárás felsorolt nagy előnyei mellett, a sugárzási károsodás igen lényeges hátrányt jelent, amelynek zavaró hatását és kiküszöbölésének módját minden esetben meg kell vizsgálni és amely az implantáció alkalmazhatóságánál az egyetlen komoly korlátozó tényezőt jelenti. Látni fogjuk, hogy sok esetben ez a tényező sem okoz problémát.

III. Az ion-implantáció alkalmazási területei

Ebben a fejezetben azokat a konkrét, már megvalósított vagy közvetlen megvalósítás előtt álló kísérleteket soroljuk fel, amelyekben az ion-implantációt mint mikroötvöztési eljárást alkalmazzák. A legfontosabb ezek közül a félvezetők ötvöztése, amely területen az ion-implantációt számos eszköz készítésénél használták sikerrel, és ezek közül sokat ipari méretekben állítottak és állítanak elő. Figyelemmel kell azonban lenni arra, hogy intenzív kutatások tulajdonképpen csak 2–3 éve folynak különböző anyagok ion-implantációs ötvöztési módszereinek kidolgozására, így az eddigi sikeres alkalmazások minden valószínűség szerint csak a kezdeti lépéseket jelentik, és már a közeljövőben számos új lehetőség kidolgozására kerül sor.

Félvezető nukleáris detektorok voltak az ion-implantációval előállított első eszközök (1962), jelenleg ezzel a módszerrel lehet a legjobb minőségű detektorokat készíteni egész vékony felületi átmeneti réteg létrehozásával [10].

Si-napelemeket készítettek ipari méretekben B és P implantálásával [11]. MOS tranzisztoros integrált áramkörök előállításánál az ion-implantációs technikával élesebb elektróda-kontúrokat értek el, ezáltal a szórt kapacitásokat csökkenteni lehetett és a hagyományosnál mintegy kétszer nagyobb határfrekvenciájú áramköröket lehetett előállítani. Ugyancsak kedvezően alkalmazható az implantáció félvezető mikrohullám-generátorok előállításánál. Ezek az eszközök Si alapanyagon, B implantálásával készülnek [12].

Sok esetben bizonyos ötvöztők nagyobb koncentrációban való bevitelét eddig csak ion-implantációval sikerült megoldani. Ilyen példák a Si Na-mal való szennyezése, GaAs-be Zn bevitele elektrolumineszcens félvezető előállítására, és egyéb nehezen ötvözhető anyagok szennyezése (gyémánt, SiC, CdS, CdTe). Általában a ve-

gyület típusú félvezetők ötvözésének ma még megoldatlan problémája talán implantációval megoldható lesz, amely számos új típusú félvezető eszközök előállítását teszi majd lehetővé (pl. elektrolumineszcens világító testek) [13].

Az ötvözés geometriájának jó kontrolálhatóságát használják ki a speciális, előírt szennyező eloszlással megvalósítható feszültségfüggő kapacitású diódák előállításánál és számológép által vezérelt fókuszált ionnyalábbal történő maszkolás nélküli integrált áramkör készítésénél [14].

Üvegek törésmutatóját implantálással befolyásolni lehet, így felületükön fényvezető szálakat lehet kialakítani [15].

A sputtering jelenséget marási eljárásként több esetben alkalmazták sikerrel [16].

Fémek felülete vagy vékony fém filmek jól ötvözhetők implantálással. Így oxid és nitrid rétegeket állítottak elő, amelyeknek a korrózióvédelemben lehet szerepük, szupravezető ötvözeteket készítettek és a módszert vékony mágneses rétegek tulajdonságainak alakítására is igyekeznek felhasználni [17].

Végül, de nem utolsó sorban meg kell említeni a tudományos alapkutatás céljaira készítendő modellanyagok előállítását. Például a precipitáció vizsgálatánál, egyes elméleti szempontból fontos, de hagyományos úton előállíthatatlan mágneses ötvözetek tanulmányozásánál használtak már eddig is ion-implantációt [18]. Az ilyen jellegű alkalmazások számának ugrásszerű növekedésére lehet szintén számítani, ahogy az eljárás részletei egyre tisztázódnak, kontrolálhatósága javul.

IV. Az ion-implantációs kutatások helyzete

A nagyenergiájú ionok és szilárd testek kölcsönhatásának vizsgálata különös intenzitással az 1950-es évek végétől folyt. Ebben a munkában a vezető szerepet az USA, Nagy-Britannia és Dánia játszotta és fontos, elsősorban elméleti eredmények születtek a Szovjetunióban is. E kutatásokból indultak ki a közvetlenül ion-implantációval foglalkozó vizsgálatok, és 1967–68 óta ezek önálló kutatási területnek tekinthetők.

Az ion-implantáció jelenleg a közepesen költséges kutatási területek közé tartozik. Az implantáló berendezésnek minimális 100 keV energiára felgyorsított és tömeg szerint szeparált ionokból kell minimálisan 10 μA áramot produkálnia az ultranagyvákuum rendszerben elhelyezett céltárgy felületén. A fő technikai problémát a kielégítő nagyságú ion-áramot adó ionforrások jelentették, azonban ma már kereskedelmi forgalomban kaphatók minden igényt kielégítő ionforrások. Ugyancsak kereskedelmi forgalomban beszerezhetők teljes implantáló berendezések, amelyek jelenlegi világpiaci ára 30 000 és 100 000 dollár közt változik, teljesítménytől függően. Az említett könnyűion szondás vizsgálatok elvégzésére szükséges kisebb teljesítményű, tipikusan 2 MV-os gyorsító berendezés felszerelése jóval költségesebb, mintegy 200 000–300 000 dollárt tesz ki. Fontos tény azonban, hogy az ion-implantációval kapcsolatos műszaki, instrumentális problémák ma már a nukleáris technika egyszerű rutinfeladatait jelentik csupán, mégha a szilárd testek kutatásában szokatlan és a viszonylag költséges módszerekkel állunk is szembe.

A kifejezetten ion-implantációval foglalkozó laboratóriumok gyors ütemben való kialakítása és felszerelése világszerte 1967 körül indult meg és mindmáig fokozódó ütemben halad, párhuzamosan a kutatások körének kiterjedésével. Ebben a

munkában az USA és Nagy-Britannia jelentős előnyre tett szert a többi országgal szemben. Az ion-implantáció eddigi legjelentősebb ipari alkalmazását két amerikai cég valósította meg, amelyek 1970 elején negyedik generációs számológépekhez készített logikai integrált áramköröket hoztak forgalomba. Ugrásszerűen fejlődtek az utóbbi két évben az ilyen irányú kutatások Japánban is, a kormány 2 millió dolláros támogatásával, és ezek eredményeként ez évben számológép által vezérelt ion-implantációs nagyüzemi tranzisztorgyártást indítottak meg. A szocialista országok közül Szovjetunióban történtek jelentős erőfeszítések az implantáció lehetőségeinek kiaknázására, így pl. sikeres kísérleteket végeztek nagyfrekvenciás tranzistorok előállítására [19].

A következő táblázatban összefoglaljuk az ion-implantációs kutatások helyzetét jellemző fő adatokat:

Kutatóhelyek száma (1969. június)		94
Kutatóhelyek száma a szocialista országokban (1970)		14
Évi ráfordítások összege (1969)	kb.	5 millió \$
Kutatók száma: (1969)	kb.	500 fő
Ráfordítások növekedési üteme (1967-től 1969-ig)	évi	80—100 %
Közvetlen szilárdtestfizikával kapcsolatos kutatások részaránya (1969)		30—40 %

Összefoglalás

Az ion-implantáció mechanizmusának és eddigi alkalmazási területeinek áttekítése azt a következtetést sugallja, hogy ez a mikroötvözési eljárás, elsősorban a félvezető technológiában, jelentős szerepet fog játszani a jövőben. Ezt alátámasztja az a tény is, hogy igen sok országban folyik igen intenzív munka ezen a területen. Az ion-implantációs kutatások hazai megindítása a fentiek alapján is szükségesnek látszik. A KFKI-ban, ahol a potenciális feltételek a rendelkezésre álló nukleáris technikai tapasztalatok révén leginkább adottak, néhány hónapja megindult a konkrét előkészítő munka. Ez az új technikai lehetőség várhatóan Magyarországon is számos kutatási területen kedvező hatású lesz, különös tekintettel az ipari-technológiai kutatásokra.

IRODALOM

1. J. Lindhard *e. a.* Phys. Rev. 124, 128, 1961.
J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schitt, Kgl. Danske Vid. Selsk. Matt.-Fys. Medd. 33, No. 14, 1963.
J. Lindhard, Kgl. Danske Vid. Selsk. Matt.-Fys. Medd. 28, No. 8, 1964.
H. Bichsel, Handb. Phys. New York, McGraw-Hill, 1963.
O. B. Firssov, ZsETF, 36, 1517, 1959.
J. A. Tyeplova *e. a.*, ZsETF, 42, 44, 1962.
T. Andersen, *e. a.*, Can. J. Phys. 46, 483, 1968.
J. F. Gibbons, Proc. IEEE. 56, 295, 1968.
J. H. Omrod *e. a.*, Can. J. Phys. 43, 275, 1965.
J. B. Sanders, Can. J. Phys. 46, 455, 1968.
I. Cheshire *e. a.*, Phys. Lett, 27A, 304, 1968.
P. Hvelplund *e. a.*, Phys. Rev. 165, 1624, 1968.
2. B. Domeij, Can. J. Phys. 42, 1624, 1964.
P. H. Barker *e. a.*, Proc. Phys. Soc. 86, 379, 1965.
P. Jaspersgard, J. A. Davies, Can. J. Phys. 45, 2983, 1967.

3. *M. T. Robinson, O. S. Oen*, Phys. Rev. 132, 2385, 1963.
4. *G. R. Piercy e. a.*, Phys. Rev. Lett. 10, 399, 1963.
M. M. Bredov e. a., Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 113, 795, 1957.
J. Lindhard, Kgl. Danske Vid. Selsk. Matt.-Fys. Medd. 34, No. 14, 1965.
G. Dearnaley e. a., Can. J. Phys. 46, 587, 1968.
F. H. Eisen, Can. J. Phys. 46, 561, 1968.
5. *G. H. Kinchin e. a.*, Rep. Prog. Phys. 18, 1, 1955.
R. S. Nelson, D. J. Mazey, Can. J. Phys. 46, 689, 1968.
M. W. Thompson, Interaction of Radiation with Solids, Ed. R. Strumane. a. Amsterdam: North-Holland, 1964.
A. Seeger, Radiation Damage in Solids, 1, 101, 1962.
P. Sigmund, J. B. Sanders, Proc. Conf. on Appl. of Ion Bombardment in Semiconductor Technology, Grenoble, 1967.
P. A. Thackery, R. S. Nelson, Phyl. Mag. 19, 169, 1969.
H. J. Matzke, Can. J. Phys. 46, 621, 1968.
D. J. Mazey e. a., Phil. Mag. 17, 1145, 1968.
G. D. Watkins, Proc. Conf. on Effects of Radiation on Semiconductors, Toulouse, 1967.
P. Glotin, Can. J. Phys. 46, 705, 1968.
J. W. Mayer e. a., Can. J. Phys., 46, 663, 1968.
E. V. Kornelson e. a., Can. J. Phys. 46, 613, 1968.
6. *O. Almén, G. Bruce*, Nucl. Instr. Meth. 11, 257, 259, 1961.
E. Foreman e. a., Can. J. Phys. 46, 753, 1968.
M. W. Thompson e. a., Phil. Mag. 18, 361, 1968.
C. Lehman e. a., Phys. Stat. Sol. 16, 507, 1966.
D. Onderlinden, Can. J. Phys. 46, 739, 1968.
7. *R. Ohl*, Bell System Tech. J. 31, 104, 1952.
8. *W. Shockley*, U. S. Patent No. 2 787, 564, 1957.
9. *J. A. Davies e. a.*, Can. J. Phys. 45, 4053, 1967 és Appl. Phys. Lett. 12, 255, 1968.
L. Eriksson e. a., Radiation Effects in Semiconductors, Ed. F. Vook, New York: Plenum, 1968.
W. M. Gibson e. a., Can. J. Phys. 46, 675, 1968.
J. A. Cairns, R. S. Nelson, Phys. Lett. 27A, 14, 1968.
10. *T. Alvåger, N. Hansen*, Rev. Sci. Instr. 33, 567, 1962.
G. Dearnaley e. a., Nucl. Instr. Meth. 71, 82, 1969.
O. Meyer, Nucl. Instr. Meth. 70, 274, 1969.
11. *W. J. King, e. a.*, Nucl. Instr. Meth. 38, 178, 1965.
12. *J. Macdougall e. a.*, Electronics, 43, No. 13, 86, 1970.
J. Brinton e. a., Electronics, 43, No. 11, 125, 1970.
H. G. Dill, R. W. Bower, Int. Conf. on Ion Implantation, Thousand Oaks, 1970.
A. U. Macrae, Int. Conf. on Ion Implantation, Thousand Oaks, 1970.
13. *J. O. McCaldin e. a.*, J. Phys. Chem. Sol. 24, 1073, 1963.
J. D. Sansbury, J. F. Gibbons, Appl. Phys. Lett. 14, 311, 1969.
F. Chernow e. a., Appl. Phys. Lett. 12, 339, 1968.
O. J. Marsh, H. L. Dunlap, Int. Conf. on Ion Implantation, Thousand Oaks, 1970.
V. Sz. Vavilov e. a., Fiz. Teh. Poluprov. 4, 10, 17, 1970.
14. *P. Brook, C. S. Whitehead*, Elect. Lett. 4, 16, 1968.
A. R. Hill, Nature, 218, 202, 1968.
15. *E. R. Schineller, e. a.*, J. Opt. Soc. Amer. 58, 1171, 1968.
M. Tarasevich, Appl. Optics, 9, 173, 1970.
16. *N. J. Freeman*, Can. J. Phys. 46, 467, 1968.
17. *J. H. Freeman*, Proc. Conf. on Appl. of Ion Beams to Semiconductor Techn. Grenoble, 1967.
J. G. Perkins e. a., Int. Cong. on Thin Films, Cannes, 1970.
18. *A. J. Freeman and R. B. Frankel*, Hyperfine Interactions, New York, Academic Press, 1967.
N. Stone (Ed), Proc. Roy. Soc. 311, 1, 1969.
19. *V. M. Guszev e. a.*, Radiotekh. i Elektronika, 14, 1487, 1969.

MÁGNESES ANYAGOK FIZIKÁJÁNAK IDŐSZERŰ KÉRDÉSEI

PÁL LÉNÁRD és ZIMMER GYÖRGY

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

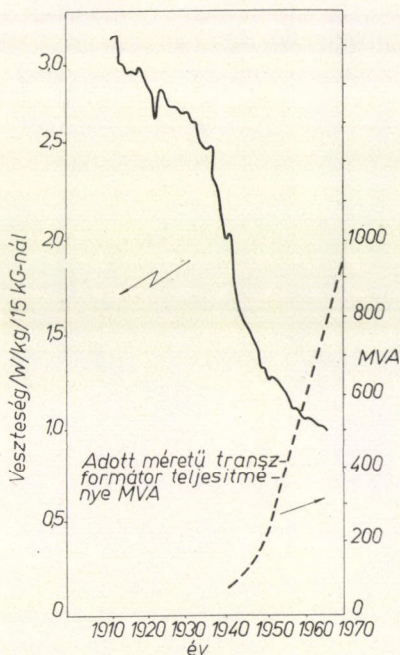
A ma emberének életét át- meg átszövik a mágneses jelenségek. Ha rádiót hallgatunk, televíziót nézünk, utazunk a villamoson vagy valamilyen probléma számítógépes megoldásán dolgozunk, észrevétlenül a mágneses anyagok egész sorát állítjuk szolgálatunkba. Ezeknek az anyagoknak a munkája annál tökéletesebb, minél észrevétlenebbek maradnak.

Ahhoz azonban, hogy a mágneses kutatások élő problémáit tárgyalhassuk, ezeket az anyagokat ki kell emelnünk észrevétlenségükből, s jelentőségükhöz méltó helyre kell tennünk a népgazdaság egészében.

A mágneses anyagok egy fejlett ipari ország össznemzeti termelésének mintegy 0,1%-át teszik ki. Ez talán nem tűnik soknak, de figyelembe kell venni, hogy viszonylag kis mennyiségű anyagokból készült alkatrészek végeznek pótolhatatlan munkát. Egy közepes számítógép tárolójában néhányszor 10 gramm ferrit van, értéke pedig több személykocsi értékével ér fel. Nagyjában-egészében elmondhatjuk, hogy körülbelül a nemzeti jövedelem 1,5%-át érintik a mágneses anyagok, s ez az összeg — amely az USA esetében mintegy 8 milliárd dollár — körülbelül kétszázszorosa annak, amit mágneses kutatásba fektetnek. Viszonylag jól megtérülő befektetésről van tehát szó.

Ez azonban természetes is, ha meggondoljuk, hogy a villamos gépek és transzformátorok vasmagjaiban évente hővé alakuló elektromos áram értéke mintegy két és félszerese az egy év alatt termelt transzformátorvas értékének. Egészen természetes, hogy minden olyan kutatómunka, amely képes tisztázni és akár csak kismértékben is csökkenteni a vasveszteségeket, gazdaságilag hallatlan jelentőségű. Az 1. sz. ábrán a jó minőségű transzformátorvas veszteségének alakulását látjuk az évek függvényében.

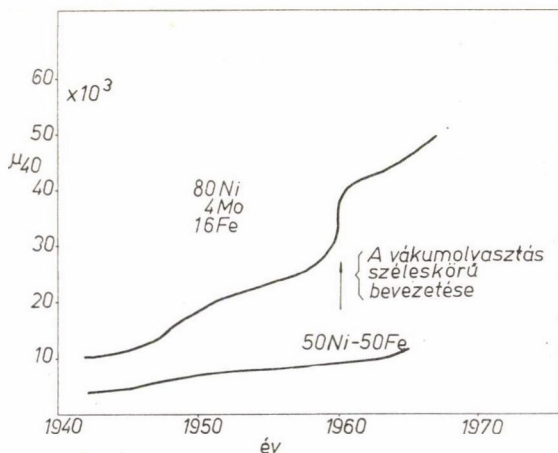
Abban az időben, amikor Déry, Bláthy és Zipernovszky elsőként alkalmazta a zárt mágneskört és megalkotta a mai érte-



1. ábra. Jó minőségű transzformátorvas veszteségének alakulása az évek függvényében

lemben vett transzformátort, az igényeket a közepes minőségű lágyacél is ki tudta elégíteni. Hamarosan fény derült a szilícium ötvöző alkalmazásának hasznosságára, s annak is több, mint hatvan éve, hogy rájöttek a hengerlési irány kitüntetett szerepére a mágneses jellemzők javításában.

Ez az időszak a mágneses kutatások hőskora volt: a technológusok empirikus recepteket gyártottak, a fizikusok pedig a ferromágnesség első modelljének megalkotásával voltak elfoglalva. A fizikai kutatómunka és a technológiai igények között szakadék volt, kölcsönhatásról nemigen lehetett beszélni. Így azután az 1910 és 1930 közötti évek csak lassú fejlődést hoztak. Ez a korszak a mágneses egykristályvizsgálatok ideje volt, a mágneses anizotrópia okainak feltárásáé; s végeredményben ennek a kutatómunkának volt köszönhető az a felismerés, hogy olyan texturált lemezt kell és lehet kialakítani, amelyben a könnyű mágnesezési irányok a szemcsék zömében párhuzamos helyzetűek. Mint látható, a fontos jelenségeknek ez a megértése — a fizikusok, metallurgusok, vegyészek teljesen egyenrangú és egymást kiegészítő munkája folytán — a veszteségek drasztikus csökkenését eredményezte, s egyidejűleg lehetővé tette, hogy a vasúti és egyéb szállítás szabta méretkorlátok figyelembevételével is egyre nagyobb teljesítményű transzformátoregységek legyenek készíthetők. Bár ma a texturált szilíciumvas fejlett országokban a transzformátorlemez-gyártási volumennek több mint 70%-át teszi ki, tulajdonságainak javítása nem került le a mágneses vizsgálatok napirendjéről: egyrészt metallurgusok és technológiai szakemberek bevonásával a nagyobb szilíciumtartalmú — egyéb előnyei mellett pl. lényegesen kisebb magnetotrikiójú és így csendesebb üzemű — vasanyagok technológiai kérdéseinek tisztázása folyik, másrészt a szekunderrekristallizációs folyamatok célszerű befolyásolása a cél a textúra és a szemcseméret egyidejű legkedvezőbb kialakítása érdekében. Tisztázatlan és élő kérdés az ipari körülmények között



2. ábra. Permalloy-típusú anyagok maximális permeabilitásának alakulása

elkerülhetetlen szennyezők hatásának vizsgálata, amelyek egyrészt a textúra kialakítását befolyásolják, másrészt a mágneses domének falát megfogják, mozgásukat gátolják, s csatolást létesítve a kristályráccsal, relaxációs (veszteségi) folyamatokra vezetnek amellet, hogy a permeabilitást csökkentik.

A precíziós váltakozóáramú alkalmazások pedig nagyon gyakran igényelnek extrém permeabilitású anyagot. A 2. sz. ábrán a Permalloy-típusú anyagok maximális permeabilitásának alakulását látjuk. Az 1960 táján megfigyelhető hirtelen ugrás a vákuumolvasztás ipari alkalmazásának tudható be, az ezt kö-

vető lassú emelkedés pedig a mágneses hőkezelés okozta változások törvényszerűségeinek feltárásával kapcsolatos. Élő kérdés ezen a területen a szennyezők szerepének további tisztázása, amelyek, mint kis szondák, egyben felvilágosítást adnak a

mikrokörnyezetükről is. Érdekes eredmények várhatók az átlagos magnetostrikciót kialakító részfolyamatok tisztázásától is.

A mágneses térben végzett hőkezelés hatásmechanizmusának alapjait lényegében sikerült tisztázni. Néel és Taniguchi a vas—nikkel típusú ötvözeteknek a Ni_3Fe összetétel táján mutatott atomi rendeződéséből kiindulva arra alapították elméletüket, hogy nem sztöchiometrikus anyagban a magas hőmérsékletű mágneses hőkezelés során nikkel—nikkel és vas—vas párok alakulnak ki a hőkezelő tér mentén. Ennek az az eredménye, hogy a szokásos kristálytani anizotrópián kívül ilyen „rendeződési” anizotrópia is keletkezik, de ez minden kristályszemcsében, a szemcse kristálytani orientációjától függetlenül, lényegében a hőkezelő mágnesestér irányát tünteti ki, tehát az anyag majdnem tökéletesen „orientáltnak” tekinthető. Eredmény: nagy permeabilitás a könnyű mágnesezés irányában és négyszögletes hiszterézishurok. A hőkezelési folyamatok részleteinek tisztázása a folyó kutatások tárgya ugyan, de az alapmechanizmus világos.

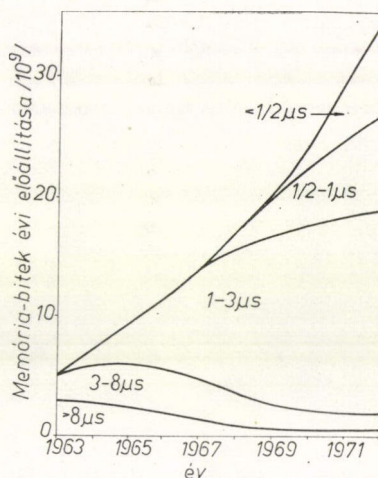
Az indukált anizotrópia hatására lényegében a mágnesezettség csak a hőkezelő-tér irányával párhuzamos és vele ellentétesen párhuzamos irányban állhat be, különösen vékony rétegben, ahol a nagyméretű anyagokban megszokott bonyolult doménstruktúra kialakulása energetikailag kedvezőtlen.

A pozitív és negatív, a fel és le, a nulla és az egy közötti különbségtétel lehetősége, amely a mágneses anyagok lényegéből fakadó sajátossága, már mintegy két évtizede, a számítógépek első generációjától kezdve, a mágneses elven működő információ-tárolás alapját képezte.

A számítástechnika hallatlan fejlődése kapcsán elmúltak azok az idők, amikor a transzformátoracél jelentette a megtermelt mágneses anyagok értékének a nagyobbik részét. Fejlett tőkés országokban a rendelkezésre álló adatok szerint már 1968-ban elérte a számítástechnikai mágneses anyagok értéke az összes megtermelt mágneses anyag értékének felét, s részaránya folyamatosan növekszik. Nem volna teljes tehát a mágneses kutatások mai helyzetét tükröző kép, ha abban nem kapna kellő súlyt a számítástechnikával kapcsolatos problémakör.

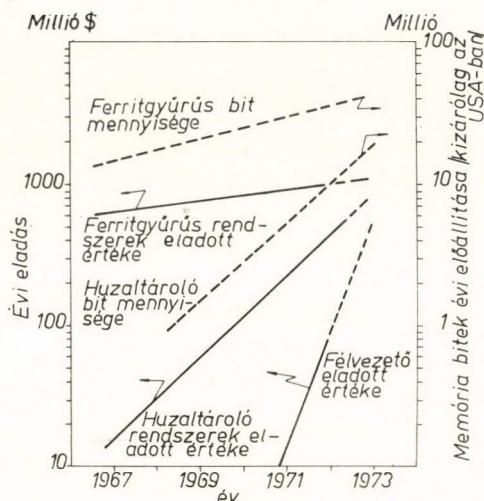
A számítógép sokféle szinten és módon tárol információkat. A részletszorzatokat „fejben tartja” az operatívmemória; a részeredményeket „leírja”, mert gyakran van rá szüksége, a fő-memória; a konstansok értékeit valamilyen kézikönyvből, a háttér-memóriából „keresi ki”. A háttér-memóriában nagyon sok információ rejtőzik, de a kikeresés folyamata lassú.

A mágneses anyagok alkalmazása elsősorban a fő-memória és a háttér-memória terén jelentős. A gépi működés gyorsulásával a fő-memória sebességének is egyre nagyobbak és nagyobbak kell lennie. A 3. ábra ezt a tendenciát mutatja. A gyártott bitszám ezermillió bit egységekben látható: ez a szám kb. megfelel az Új Magyar Lexikon információtartalmának. Világosan látszik az a tendencia, hogy az idő múlá-

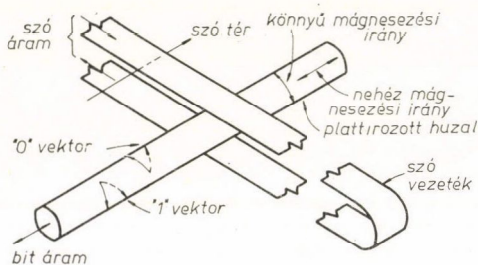


3. ábra. A tárolóbitok sebesség szerinti megoszlása az elmúlt években

sával a tárolók működési ideje rövidül. Ma túlsúlyban az 1—3 mikroszekundum közötti működési idejű ferritmagos tárolók vannak. De úgy tűnik, hogy ezek a tárolók elérték fejlődésük csúcsát; sebességük fokozása csak a méretek további csökkentésével volna lehetséges, ez azonban a magok tényleges tárolóvá való összeépítését nehezíti meg. A 4. ábrán látható, hogy bár ma még túlnyomó a ferrittárolók



4. ábra. Tárolók eladott értékének alakulása



5. ábra. A huzalban tárolt információ a kerületmenti mágnesezés körüljárási irányától függ

uralma, egyre nagyobb szerephez jut a mágneses tárolók között a huzaltároló, de erőteljes a félvezető-bázisú, integrált áramkörökre épülő tárolók fejlődése is.

A huzaltároló mágneses bevonattal ellátott nem-mágneses huzal, amelynek bevonatában mágneseteres hőkezeléssel kerület-irányú könnyű mágnesezési irányt alakítanak ki. Az 5. ábrán látható, hogy a huzal egy elemi információ tárolására használt szakasza aszerint tartalmaz logikai 1-nek vagy 0-nak megfelelő információt, hogy a kerületmenti mágnesezés pozitív vagy negatív körüljárási irányának felel-e meg.

Az információ beírása egyszerűen történik. A huzalt körülvevő hurok, amelyet szóvezetéknek nevezünk, tengelyirányú — tehát a nehéz mágnesezési iránynak megfelelő — teret kelt. Ennek hatására a mágnesezettség kibillen a nyugalmi helyzetéből, s többé-kevésbé merőleges helyzetet vesz fel, iránya közeledik a nehéz mágnesezés irányához. Amikor a huzalon, amelyet „bit” vezetéknek nevezünk, áramot engedünk át, ennek kerület-irányú mágneses-tere az áramiránytól függően az egyik vagy a másik könnyű mágnesezési irány felé billenti a mágnesezettség vektorát, amely a terek kikapcsolása után abba a könnyű mágnesezési

irányba esik vissza, amely a beírás alatti helyzethez közelebb volt.

A folyamat annyira egyszerű és tiszta, hogy nem is érthető azonnal, miért kell megemlíteni ezt a jelenséget a mágneses kutatás élő problémái között. Pedig nagyon sok alapvető kérdés vár itt még tisztázásra. Ilyen pl. a mágneseteres hőkezelés, amelynek eredményeként, sajnos, a nehéz mágnesezési irány nem mindenütt pontosan tengelyirányú, hanem kissé szór. Ennek a jelenségnek a tároló megbízható működésében van nagy jelentősége, és a szórás okainak tisztázása csak jól megalapozott fizikai kutatómunkával lehetséges, amelynek eredményeképpen a mikro-feszültségek, mikro-rendeződési folyamatok és szennyezések szerepe érthetővé válik. Nagyon lé-

nyeges, de tisztázatlan kérdés azoknak a fizikai folyamatoknak a felderítése, amelyek a mágneses paraméterek időbeli változását eredményezik. Itt alapvető felismerések várhatók, hasonlóan ahhoz, ahogy a tranzistorok időbeli instabilitásának vizsgálatából a félvezető-felületfizika egész gondolatköre kinőtt.

A perifériás tömegtárolásra (háttér-memóriának) ma mágnesszalagot, mágnes-tárcsát használnak. Voltaképpen itt megfelelő hordozóra felvitt gamma-vasoxid az információtárolás anyaga, illetőleg tárcsáknál alumínium vagy más alapra a legkülönbözőbb úton-módon felvitt kobalt-nikkel-foszfor réteg. A feladat elsősorban technológiaiak látszik. A kellő mechanikai ellenállóságot és a jó mágneses tulajdonságokat kell egyesíteni. Nem lehet azonban kizárni újabb mágneses felismerések nyomán új tárolóanyag felfedezését; például elképzelhető volna az ún. kicserélődési-anizotrópia jelenségének alkalmazása is, elsősorban a csak-kiolvasótípusú (read only memory) mozgóközegek mágneses tárolókban.

A mágneses kutatások aktuális feladatai között azonban nemcsak a számítástechnikai anyagok fejlesztését szolgáló feladatok találhatók meg, hanem az új jelenségek keresésével összefüggő feladatok is. Az utóbbi évek egyik nagy hatást kiváltó felismerése (vagy inkább ötlete?) volt a vékony szigetelő kristálylapkákban fenn tartható és mozgatható stabil mágneses domének, az ún. mágnesbuborékok felhasználása információ tárolására és feldolgozására. Az információtárolás közege itt egykristálylapka, amelyben a telítési mágnesszettség és az anizotrópia különleges alakulása folytán kisméretű — néhány vagy néhányszor tíz mikron átmérőjű — stabil mágneses domének kelthetők. Ezek jelenléte, vagy hiánya jelenti az információ-tartalmat, a közöttük levő magnetosztatikai kölcsönhatás pedig logikai műveletek végzésére ad módot.

Érdekes módon semmilyen ma ismert mágneses anyag sem alkalmas ennek a gondolatnak ideális megvalósítására, úgyhogy itt alkalmazott oldalról felvetődött alapkérdésként kerül a vizsgálatok előterébe az anyagi paraméterek közül most az anizotrópiának a szándékos befolyásolása pl. adalékokkal, ami az anizotrópia okainak még mélyebb megértését teszi szükségessé.

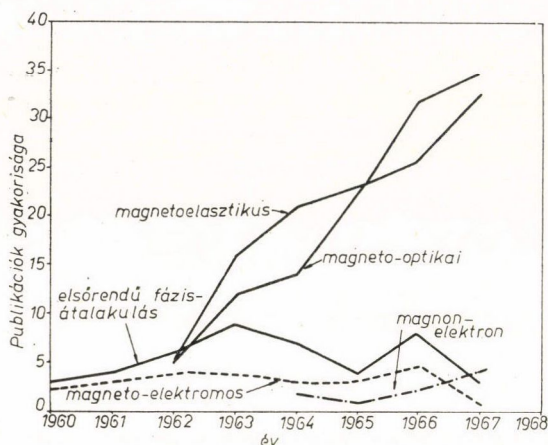
További érdekes lehetőség a számítástechnikában a fény alkalmazása tárolásra és bizonyos mértékű információfeldolgozásra. Ez a magneto-optikai anyagok és jelenségek fontosságára hívja fel a figyelmet. Egy ilyen lehetőség például a fénysugárzás energiatartalmának hasznosításával lokális hőmérséklet-emelkedés létesítése, amely azután valamilyen mágneses szerkezetváltozás felhasználásával tárolhatja a fény jelenlétével közvetített információt.

A mágneses szerkezetek vizsgálata önmagában is érdekes és fontos feladat. Voltaképpen a kérdés hasonló a kristályfizikának ahhoz a mindmáig megválaszolatlan alapkérdéséhez, hogy valamely anyag miért éppen úgy kristályosodik, ahogy az megfigyelhető és miért nem másképpen. Miért mágneses egy anyag, miért állanak például a vasban a mágneses momentumok párhuzamosan a Curie-pont alatt és miért antiferromágneses a króm? E kérdések megválaszolása első principiumokból mindeddig nem sikerült. Több olyan fázisa is volt már a tudománynak, amikor úgy tűnt, hogy a válasz megvan. A Weiss-féle molekuláris-térelmélet, majd a kicserélődési kölcsönhatás felismerése és a mágnesség Heisenberg modellje és ennek különböző, további közelítéseket tartalmazó variánsai azonban nem bizonyultak mindenütt helytállónak. A szigetelők esetén a mágnesség oka tisztázottnak tekinthető, s így az a furcsa helyzet állott elő, hogy a nemrégiben szintetizált köbös szerkezetű, szigetelő ferromágnesről, az európiumoxidról többet tudunk, mint az évszázadok

óta ismert és vizsgált vasról. Ez persze a vezetési elektronokból adódó nehézségekkel kapcsolatos, de míg például a réz-nikkel ötvözetek terén, amelyeket a ferromágnesség (merev-) sávmodellje legjobb példájának tartottak a tankönyvek is, éppen a legutóbbi években bontakozott ki késhegyre menő vita különböző kutatócsoportok

között a mágnesség eredete kérdésében.

Számos elvi érdekességű probléma tisztázható nem mágneses vezető mátrixba helyezett szennyezők viselkedésének tanulmányozásával, mert ez esetben az elméleti értelmezés egyszerűbb, és a mérésekkel való összevetés közvetlen. Érdekes gyakorlati vonatkozású mellékeredmény, amely a látszólag csak „vajt”-fülűeknek szánt „tisztá” tudományt szinte mindig összekapcsolja a gyakorlattal, az ún. nem-mágneses ötvözetek szennyezőinek viselkedésével kapcsolatos különféle felismerés, amelyek — úgy tűnik — ténylegesen jobb anyagok előállítását teszik lehetővé.



6. ábra. Mágneses „alap” kutatások publikáció-eloszlása az utóbbi években

A már kialakult mágneses rend egy másik mágneses renddel való összevetésétől is sokat várhatunk. A 6. ábrán a mágneses „alap” kutatások publikáció-eloszlását mutatjuk be az utóbbi években. Látható, hogy a fázisátalakulások tanulmányozása érdekes terület, mert ha azt nem is tudjuk megmondani, hogy melyik fázis miért alakult ki, de választ várhatunk arra a kérdésre, hogy mi okozza az egyik fázis instabilitását egy másikhoz képest, amikor a fázisátalakulás nyomás, hőmérséklet, mágneses tér, stb. hatására létrejön. Így például úgy tűnik, hogy az elektron-gáz entrópiája, amelynek lényeges szerepet csak alacsony hőmérsékleten tulajdonítottak, magas hőmérsékletű átalakulásokban is döntő lehet.

Nagy érdeklődésre tartanak számot a kialakult mágneses rend gerjesztett állapotai, a spinhullámok és a külső dinamikus perturbációk közötti kölcsönhatások (a magneto-elasztikus és a magneto-optikai) vizsgálatai is. Ezek a spinrendszer gerjesztett állapotaira adott elvi jelentőségű felvilágosításokon túlmenően gyakorlati alkalmazásra is számot tarthatnak a jövőben, s talán nem túlzás feltételezni, hogy az ábrából is kifejeződő „divatjuk” éppen potenciális számítástechnikai alkalmazásaiuknak tudható be.

Érdekes terület a mágneses kutatásnak az olyan mágnesesen rendezett anyagok vizsgálata, amelyekben egyidejűleg ferroelektromos rend is van. Ez az elsősorban a Szovjetunióban művelt téma a kétféle rend egymásra hatásának számos érdekes kérdését veti fel.

Végezetül érdemes körülnézni a mágneses vizsgálatok és a többi tudományág kapcsolata terén. A térelmélet módszerei a szilárdtestfizikában és így a mágnességben is ugrásszerű fejlődést hoztak. A mágnesség modelljei (pl. az Ising modell)

ugyanakkor olyan, látszólag távollevő területen vezettek eredményre, mint a biológia (a hemoglobin oxidációs folyamatának modellszerű leírását csak példaként említjük meg). Számos más terület, elsősorban a kémia, köszönhet sokat a mágneses (részben rezonancia-) módszerek alkalmazásának. A mágneses jelenségek gyakran modelljei általános, a kölcsönhatások természetére kevésbé érzékeny törvényszerűségeknek. Ilyenek a másodrendű fázisátalakulásoknál fellépő kritikus fluktuációk, melyeket gyakran és sikerrel tanulmányoznak mágneses anyagokon Curie-pont közelében.

Áttekintve az elmondottakat, meg kell állapítani, hogy az idő rövidegére és a hallgatók türelmének véges voltára tekintettel sok mindent el kellett hagynunk, ami fontos. Nem esett szó például, pedig fontosságuk miatt méltatlanul, a mikro-hullámú és nagy permeabilitású ferrit anyagokról, amelyek a mágnesség tisztázott alapkérdései gyakorlati alkalmazásának nagyon jó példái. Ez azonban nem érinti azt az összefoglaló értékelést, hogy a mágneses anyagok fizikájának élő problémái az alapkérdések vizsgálata és az alkalmazások olyan összefonódását tükrözik, amellyel talán csak a félvezetők fizikája állítható ma párhuzamba.

A FÉMEK MECHANIKAI TULAJDONSÁGAINAK VÁRHATÓ FEJLŐDÉSE

PROHÁSZKA JÁNOS

Villamosipari Anyagtechnológia Tanszék, BME

A MTA Elnökségének az 1970. évi Tudományos Ülésszakra vonatkozó koncepciója, valamint az előadás címének megfelelően az alábbiakban kísérletet teszek arra, hogy a rendelkezésre álló adatok és ismeretek alapján a fémek mechanikai tulajdonságainak belátható fejlődéséről áttekintést adjak. Az előadás korlátozott terjedelme miatt azonban elsősorban a fémek és ötvözetek terhelhetőségéről lesz szó, amit a folyási (rugalmassági) határ szab meg, vagyis az a felületegységre eső erő, mely a képlékeny alakváltozást éppen megindítja. A folyási határ kiemelését indokolja az a tény, hogy az évenként Magyarországon gyártott, mintegy 3 millió tonna fémnek és ötvözetnek a túlnyomó mennyiségét a folyási határnak az alapján minősítik, ill. használják fel. Elenyészően kevés az előállított mennyiségnek az a hányada, amit más paraméterek (villamos, mágneses hőállóság stb.) szerint ítélnék meg.

Mivel az esetek többségében — adott terhelés mellett — a folyási határ szabja meg a fémekből készített berendezések méreteit és súlyát, nyilvánvaló, hogy gyártásuknál (első közelítésben) annnyival kevesebb anyagot kell felhasználni, ill. annnyival csökkenthető súlyuk, amennyivel nagyobb a felhasznált anyagok folyási határa. Ez pedig azt jelenti, hogy ha csak 10%-kal sikerül a folyási határt megnövelni, úgy 10%-kal kevesebb anyagot kell előállítani, vagy más fogalmazásban 10%-kal növelhetjük a hazai gyártó kapacitást beruházás nélkül, és ehhez járul még a berendezések könnyebb súlyával, kisebb méretével jelentkező kedvezőbb piaci helyzet. Ennek a lehetőségnek óriási gazdasági jelentősége van, mert csak a vasalapú ötvözetek évi termelési értéke 25 milliárd Ft és ennek 10%-a évenként 2,5 milliárd Ft.

Az elmondott néhány tény adja meg a fémek mechanikai tulajdonságainak várható fejlődésével kapcsolatos népgazdasági jelentőségét, de a probléma időszertűségét is.

A folyási határ fejlődésének várható alakulását, mint minden egyéb hasonló mennyiséget általában háromféle úton szokás megbecsülni:

- a) extrapolációval az elmúlt időszak eredményeiből
- b) a szakterület elismert tudósainak a véleményei szerint és
- c) az új kutatási eredmények törvényszerűségeinek az alapján

A műszaki életben az extrapoláció rendszerint alábecsüli a fejlődést, különösen az utóbbi években, mert a természettudományos eredmények a fejlődést — a korábbihoz képest — nagyobb mértékben gyorsítják. A következőkben — ahol ez rendelkezésre állt — felhasználtam tudósaink véleményét, de figyelembe vettem a korszerű elméletben kidolgozott, ill. javasolt összefüggéseket is a várható maximum meghatározására. Ezen túlmenően nemcsak a számszerű eredmény közlése volt a célom, hanem az is, hogy felhívjam a figyelmet arra, hogy a szóban forgó tulajdonság javítás milyen módszerekkel valósítható meg és azt a korszerű elmélet milyen modell

segítségével értelmezi, és az adott modell révén milyen a legnagyobb várható fejlődés. Így ugyanis kézbentartható és mérlelhető az a néhány technológiai folyamat, mely a jobb minőségű, nagyobb szilárdságú ötvözetek előállításához vezet.

A fémalapú szerkezeti anyagok mechanikai tulajdonságainak a javítása, jelenlegi ismereteink szerint az alábbi technológiai műveletekkel valósítható meg:

ötvöztetés,

képlékeny alakítás,

hőkezelés és

besugárzás nagyenergiájú részecskékkal

Az utolsó lehetőséget kivéve — mely ma még csak laboratóriumi módszer — a megadott eljárásokat hosszú idő óta használják a fémek és ötvözetek mechanikai tulajdonságainak javítására és így természetesen a folyási határ növelésére is. A gyorsabb fejlődés, az eredményesebb kutatás azonban megköveteli, hogy a felsorolt technológiai műveletek mögött megismerjük azokat az okokat, melyek a tulajdonságváltozásokat létrehozzák.

A technológiai műveletek az anyagok szerkezetét változtatják meg és ez a szerkezetváltozás tükröződik a tulajdonságváltozásokban. Régi törekvés ezért az, hogy a szerkezet sajátosságainak ismeretében valamilyen modell alapján számítással határozzuk meg a tulajdonságokat jellemző paramétereket. Így pl. Griffith [1], (1920) összefüggést vezetett le az ún. elméleti törőszilárdságra a σ_{ci} -re, azzal a feltevéssel, hogy a ridegen törő anyagokban c méretű repedések vannak.

Ezek szerint

$$\sigma_{ci} = \sqrt{\frac{2\gamma E}{\pi c}} \quad (1)$$

Ahol γ a szóban forgó anyag felületi energiája, „ E ” pedig a rugalmassági modulusa. A ridegen, képlékeny alakváltozás nélkül, törő anyagok minőségét tulajdonképpen a σ_{ci} értéke, az ún. törőszilárdság alapján minősítik és így ugyanolyan fontos paraméter, mint a szívós anyagok folyási határa.

Frenkel [2] (1926) az elméleti folyási határt, számításai alapján a kristályszerkezet állandóinak a segítségével az alábbiak szerint adta meg

$$\sigma_{fi} = \frac{a}{b} \frac{G}{\pi} \quad (2)$$

Itt σ_{fi} az elméleti folyáshatár „ G ” a csúsztató rugalmassági modulus. „ a ” a legközelebbi szomszédok távolsága csúszósíkban, „ b ” pedig a csúszósíkok távolsága.

Mind Griffith, mind Frenkel eredménye nagy vitát keltett, mert az akkor ismert anyagok kísérleti úton mért törőszilárdsága és folyási határa 2—3 nagyságrenddel kisebb volt, mint az elméleti úton számított érték. A szakemberek jelentős része az elméleti számítás alapjául szolgáló modellt okolta a számított és mért értékek közötti nagy eltérésért annak ellenére, hogy Orowán [3], Polányi [4] és Taylor [5] mindhárman 1934-ben a kristályok egy különleges hibájának az ún. diszlokációnak tulajdonították a feltűnően nagy különbséget.

Rengeteg kísérlet irányult arra, hogy a Frenkel modellt javították, módosították, de még egy teljes nagyságrenddel sem sikerült az ún. elméleti folyási határt a 2. képletben megadotthoz képest csökkenteni. Ezt a helyzetet gyökeresen megváltoztatta az, hogy az 50-es években egész sor olyan kristályt állítottak elő Gyulai [6] (1954),

Brenner [7] (1958) és Gilman [8] (1959), melyek folyási határa nagyon jól megközelítette az elméleti értéket. Azóta számtalan anyagból előállítottak ilyen ideális szilárdságú kristályokat. Sajnos ezek mérete alig éri el az 5 mikron vastagságot és ezért gyakorlati felhasználásra jelenleg alkalmatlanok.

A fémek mechanikai tulajdonságai és technológiája problémájában azonban felbecsülhetetlen jelentőségű a tűkristályok (whiskers) felfedezése, mert egyértelműen bizonyította, hogy a Frenkel modell és a belőle számolt elméleti folyáshatár reális érték, közvetve pedig azt is, hogy a kísérleti úton mért folyási határ valóban a diszlokációk jelenlétének a következménye. Ugyanis ezeknek a nagyon kisméretű sörte, vagy tűkristályoknak a folyási határa azért éri el az elméleti értéket, mert méretük olyan kicsi, mely általában nem teszi lehetővé bennük a diszlokációk kialakulását.

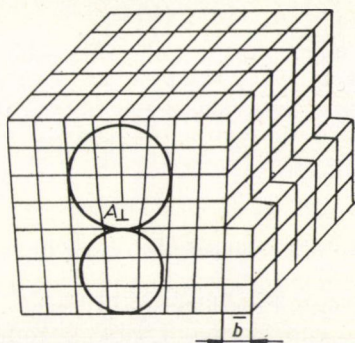
Végeredményben tehát bebizonyosodott, hogy

1. a tökéletes vagy közel tökéletes kristályok σ_{fi} folyási határa az elméleti értékkel azonos nagyságrendű közel $0,06G \sim 0,3G$ és hogy
2. a közönséges fémek és ötvözetek több nagyságrenddel kisebb folyási határa annak következménye, hogy ezek nagyszámú diszlokációt tartalmaznak, melyek irreverzibilis mozgása a mért folyási határnak megfelelő feszültségnél megkezdődik. A diszlokációk irreverzibilis mozgása pedig képlékeny alakváltozással jár.

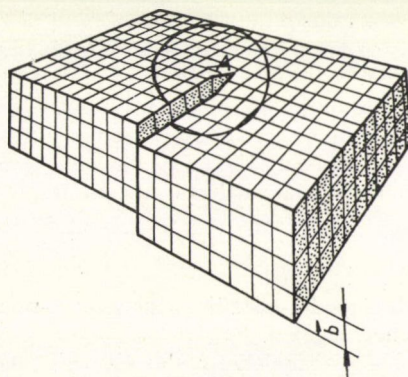
E két megállapításból azonban az is kiderül az első pillantásra, hogy a folyási határ növelése elvileg szintén kétféle módon érhető el:

- a) ideális szerkezetű, diszlokációmentes kristályok előállításával, vagy
- b) a reális szerkezetű kristályokban a diszlokációk mozgásának a megakadályozásával.

Normális méretű néhány cm vastag, diszlokációmentes fémeket eddig nem sikerült előállítani annak ellenére, hogy az ilyen irányú kutatások száma nagy. Sokkal kézzelfoghatóbb eredményeket szolgáltat a diszlokációk mozgásának a korlátozása. Minden szilárdságnövelésre irányuló kutatás a múltban önkéntelenül, jelenleg pedig tudatosan a diszlokációk mozgásának a megindulását korlátozza. Minél nagyobb feszültségnél indulnak mozgásnak a diszlokációk, annál nagyobb a mért folyási határ.



1a ábra



1b ábra

A következőkben részletesen áttekintjük, hogy a már említett technológiai folyamatok milyen mechanizmusok révén gátolják a diszlokációk mozgását és növelik a folyási határt. Előbb azonban az 1. ábrán bemutatjuk a diszlokációk két legegyszerűbb és legáltalánosabb típusát azoknak a részleteknek a kihangsúlyozására, melyek a szilárdságnövelésnél a legfontosabbak.

Az 1a. ábra egy ún. éldiszlokációt mutat, mely az A pontban a kristály homlok-felületére merőlegesen helyezkedik el a kristályban. Ha egy ilyen diszlokáció végig-
haladt a kristályban a \perp jellel megadott csúszósíkon, akkor a kristály felső része az alsóhoz képest \bar{b} értékkel irreverzibilisen elmozdult, a kristály képlékenyen alakult. Az 1b. ábra egy ún. csavardiszlokációt szemléltet, mely a kristály felső felületére merőlegesen foglal helyet a kristályban az A pontból kiindulva. A kristály homlok-felületén látható az az alakváltozás, melynek nagysága \bar{b} és amit a csavardiszlokáció a beárnyékolt (az A ponton átmenő) felületen végighaladva létrehozott.

Mindkét diszlokáció közvetlen környezetében körökkel jelöltük meg azokat a tartományokat, ahol a kristályok rugalmas torzulása rendkívül nagy. Ezek a rugalmas tartományok játsszák a mechanikai tulajdonságok megszabásában a legfontosabb szerepet. Az éldiszlokációnál a csúszósík alatt és felett erősen összenyomott, ill. szétfeszített tartomány van annak következtében, hogy ez a diszlokáció egy olyan extra kristálytani síknak az éle, melynek a csúszósík alatt nincs folytatása. A csavardiszlokáció körül pedig csúsztató feszültség alakul ki, mely csak a közép-ponttól mért „ r ” távolságnak a függvénye.

A gondosan kilágyított fémkristályok négyzetcentiméterenként 10^6 – 10^7 diszlokációt tartalmaznak, melyek finom hálózatként átszövik az egész kristályt. A diszlokációkat körülölelő rugalmasan torzult tartományok kölcsönösen hatnak egymásra, de minden egyéb ok miatt a kristályban kialakult feszültségmezőre is. Ezeknek a feszültségmezőknek a kölcsönhatása akadályozza a diszlokációk mozgását. Így tulajdonképpen a folyási határ növelése olyan feszültségmezőknek a létrehozását jelenti, melyek a diszlokációk mozgását akadályozzák.

A diszlokációk mozgását akadályozó feszültségmezők kialakítása, ill. a folyási határ növelése a következőképpen érhető el:

- a) képlékeny alakváltozással
- b) krisztallithatárok létrehozásával
- c) szilárd oldat létrehozásával
- d) kiválások létrehozásával
- e) diszperz részecskék létrehozásával
- f) diffúzió nélküli (martenzites) átalakulással
- g) rendezett rácsú szilárd oldat létrehozásával

A számszerű értékek összehasonlítása érdekében meg kell adni azt a σ_e folyási határt is, mely a jól kilágyított egykristályokban a diszlokációk mozgását és ezzel a képlékeny alakváltozást megindítja. Ezek a kísérleti úton meghatározott értékek a

$$10^{-5} G - 10^{-3} G$$

tartományba esnek.

Most pedig nézzük meg pontról-pontra a korábban felsorolt folyási határt növelő lehetőségeket.

ad a) A képlékeny alakváltozás tulajdonképpen a diszlokáció-sűrűséget növeli. A nagyobb diszlokáció-sűrűségű kristályban erősebb a diszlokációk közötti kölcsönhatás és ezért mozgásukhoz nagyobb feszültségre van szükség. Taylor volt az

első, aki meghatározta a folyási határt a diszlokációk ϱ sűrűségének a függvényében és az alábbi kifejezésre jutott:

$$\sigma_k = \alpha \frac{Gb}{\pi} \sqrt{\varrho} = \alpha \frac{Gb}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon}{bL}} \quad (3)$$

Itt α egy állandó, mely csavardiszlokációknál éppen az egység, éldiszlokációknál pedig kb. 1,5 „ b ” a diszlokációk Burgers vektora, ami nem más mint kristályban a legközelebbi atomok távolsága, ε az alakváltozás mértéke, „ L ” pedig a diszlokációk szabad úthosszúsága. Az egyenlőség jobb oldala a szakítógörbék jól ismert alakjának felel meg. (Itt meg kell jegyezni, hogy a ϱ diszlokáció-sűrűség függvényében megadott értékek csak a jól kilágyított kristályoknál nagyobb diszlokáció-sűrűségű anyagokra vonatkoznak. Ha a diszlokáció-sűrűség ennél kisebb, akkor az összefüggés hiperbolikus és a folyáshatár a ϱ csökkenésével nő. (Ez azonban a műszaki gyakorlatban felhasznált anyagokban nem fordul elő.)

Ha azonban az egykristályok feszültség-alakváltozási görbéjét megnézzük kiderül, hogy az nem mindig felel meg a 3. egyenlet parabolikus törvényének, amint az a 2. ábrán látható.

Az alsó görbe olyan kristály alakítási feszültségét mutatja be az alakváltozás függvényében, melyben a csúszás egyetlen csúszási rendszeren indul meg. Az ilyen ún. egyszerű csúszásnak megfelelő alakváltozás tartozik az I. szakaszhoz. Amikor a kristály orientációja az alakváltozás közben már annyira megváltozott, hogy a csúszás egyszerre két csúszási rendszeren megy végbe, a feszültség a II. szakasz szerint nő. Végül a III. szakaszra az jellemző, hogy a mozgó diszlokációk saját csúszó síkjukon már alig tudnak lényeges utat megtenni és más csúszó síkra kényszerülnek. Természetesen mindhárom szakaszban a képlékeny alakváltozás okozta folyáshatár-növekedés más-más törvényszerűséggel megy végbe.

A 2. ábra felső görbéje a polikristallin, a gyakorlati fémek folyási határának a változását mutatja. Látható, hogy ez leginkább a III. szakasznak felel meg. Ennek a szakasznak a leírására Seeger [9] az alábbi összefüggést vezette le:

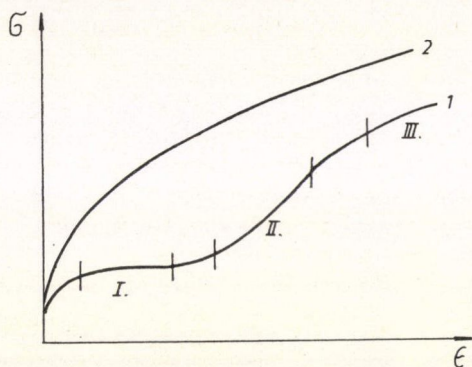
$$\sigma_k = \frac{2}{n} \left(\frac{1}{2\pi} - \frac{2}{b} \gamma_- \right) \quad (4)$$

Itt n azoknak a diszlokációknak a száma, melyek valamilyen akadály miatt feltorlódnak, γ pedig az ún. rétegződési hibának, a felületegységre eső energiája.

Ugyanerre a szakaszra más modell alapján Kocks munkatársaival [10] az alábbi eredményre jutott:

$$\sigma_k = kGb\sqrt{\varrho} \quad (5)$$

Látható, hogy ez az összefüggés csak a „ k ” állandóban különbözik Taylor kifejezé-

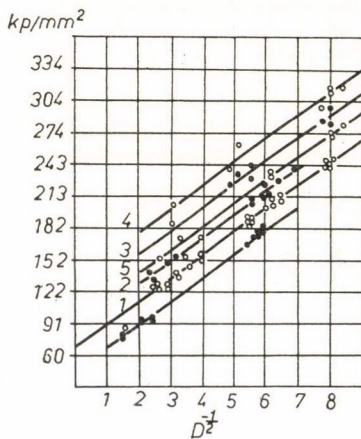


2. ábra

sétől. Ez utóbbi kifejezésben a szerzők a „ k ” értékét 0,4—1,0-re becsülik attól függően, hogy milyen az az akadály, mely a diszlokációk mozgását oly mértékben akadályozza, hogy azok feltorlódnak (pile up).

A három összefüggést mérlegelve nyilvánvaló, hogy a 3. és az 5. összefüggés közel azonos. Annak ellenére, hogy a kiindulási modellek lényegesen eltérnek egymástól. Látszólag egészen más jellegű Seeger képlete, mely a diszlokáció-sűrűséget kifejezetten nem is tartalmazza. Közvetve azonban benne rejlik, mert a feltorlódtott diszlokációk „ n ” száma nyilvánvalóan annak a függvénye. Eredményében azonban semmi esetre sem térhet el jelentősen a másik két kifejezéstől, mivel ugyanazt a szakaszt írja le, mint *Kocks* és munkatársai.

Az I. táblázatban a képlékeny alakváltozás, ill. a diszlokációk sűrűségének a hatását néhány fémre számszerűen is megadtam azzal a feltételezéssel, hogy a maximális diszlokáció-sűrűség 10^{10} cm^{-2} , annak ellenére, hogy irodalmi források szerint ez két nagyságrenddel nagyobb is lehet. A maximális értéket kihasználni azonban jelenleg nem tudjuk. A térben középpontos köbös fémekben ugyanis nagyobb diszlokáció-sűrűségnél *Cottrell* [11] szerint egy különleges diszlokáció típus alakul ki, mely az egymásra merőleges repedések [12] egész sorát hozza létre és így törékennyé válik az anyag. A felületen középpontos köbös fémekben pedig — melyek rendszerint alacsonyabb olvadáspontúak — megindul a lágyulás. Végeredményben tehát a képlékeny alakváltozás hatására a folyási határ



3. ábra

értékre nő.

ad b) A kristallithatárok folyási határt növelő hatásának a leírására *Petch* [13] tapasztalatai alapján jutott az alábbi összefüggésre:

$$\sigma_h = \sigma_e + \frac{K}{\sqrt{D}} \quad (6)$$

ahol σ_e az egykristály folyási határa, „ K ” egy, az anyagtól függő állandó, „ D ” pedig a kristallitok átlagos átmérője. Az összefüggés helyességét mutatja néhány anyagra a 3. ábra.

Koehler [14] és *Stroh* [15] diszlokációs modell alapján határozták meg a 6. egyenlet „ K ” értékét¹⁶. Szerintük

$$K = \sqrt{\frac{8Gb\sigma_m}{\pi(1-\nu)}} \quad (7)$$

Itt a σ_m a szemcsehatároknál feltorlódtott diszlokációk okozta feszültségcsúcsot jelenti (ld. a 4. ábrát). A „ K ” értéke nagymértékben függ attól, hogy milyen távol van a diszlokációk „ L ” forrása a szemcsehatártól és ezért hatását megbecsülni nehéz. *Verő* [17] mintegy 20 kp/mm^2 értékre becsüli azt a folyási határ növekedést, ami a szemcseméret csökkentésével az α vasban elérhető akkor, ha a minimális szemcseméretet 10^{-3} cm nagyságúnak tételezzük fel. Ez azt jelenti, hogy a szemcsehatárok következtében elérhető folyási határ növekedése közelítőleg

$$\sim 2 \cdot 10^{-3} G$$

I. TÁBLÁZAT

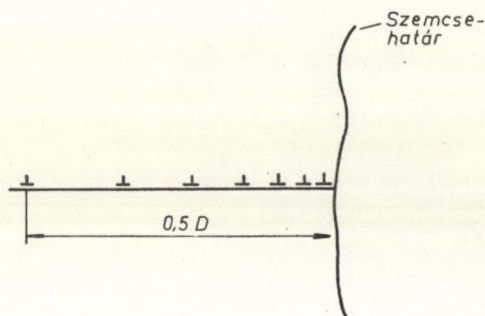
Sorszám		G (kp/mm ²)	b (mm)	$b\sqrt{\varrho}$	$G \cdot b \cdot \sqrt{\varrho}$ (kp/mm ²)
1	Al	2 700	$\frac{1}{2} 4,049 \cdot \sqrt{2} = 2,86 \cdot 10^{-7}$	$2,86 \cdot 10^{-3}$	$7\,722 \cdot 10^{-3}$
2	Cu	4 800	$\frac{1}{2} 3,6153 \cdot \sqrt{2} = 2,56 \cdot 10^{-7}$	$2,56 \cdot 10^{-3}$	$12\,288 \cdot 10^{-3}$
3	Cr	7 400	$\frac{1}{2} 2,8845 \cdot \sqrt{3} = 2,50 \cdot 10^{-7}$	$2,50 \cdot 10^{-3}$	$18\,500 \cdot 10^{-3}$
4	Fe	8 300	$\frac{1}{2} 2,8664 \cdot \sqrt{3} = 2,48 \cdot 10^{-7}$	$2,48 \cdot 10^{-3}$	$20\,584 \cdot 10^{-3}$
5	Mo	12 800	$\frac{1}{2} 3,1466 \cdot \sqrt{3} = 2,72 \cdot 10^{-7}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$	$34\,816 \cdot 10^{-3}$
6	Ni	7 450	$\frac{1}{2} 3,5238 \cdot \sqrt{2} = 2,49 \cdot 10^{-7}$	$2,49 \cdot 10^{-3}$	$18\,550,5 \cdot 10^{-3}$
7	V	4 660	$\frac{1}{2} 3,039 \cdot \sqrt{3} = 2,63 \cdot 10^{-7}$	$2,63 \cdot 10^{-3}$	$12\,255,8 \cdot 10^{-3}$
8	W	16 000	$\frac{1}{2} 3,1648 \cdot \sqrt{3} = 2,74 \cdot 10^{-7}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$	$43\,840 \cdot 10^{-3}$

ad c) A szilárd oldatot képező ötvöző elemek körül szintén erősen eltorzul a kristály. Ez a feszültséggel terhelt tartomány lép kölcsönhatásba a diszlokációkkal, melynek egyik eredménye a folyási határ növekedése. Az irodalomban az oldott atomok hatásának a leírását a folyási határra többféleképpen adják meg attól függően, hogy milyen modellt szolgál a leírás alapjául. A legelső és leggyakrabban idézett összefüggést Mott és Nabarro [18] írta le, mely szerint a folyáshatárnövekedés

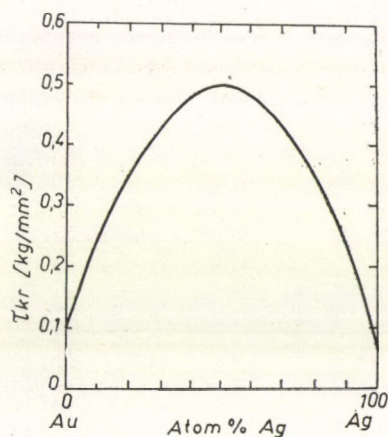
$$\sigma_c = G\epsilon^2 c \quad (8)$$

vagy

$$\sigma_c = 2,5G\epsilon^{4/3} c \quad (9)$$



4. ábra



5. ábra

Az összefüggésekben ϵ az oldó és az oldott atomok fajlagos méretkülönbségét jelenti, azaz

$$\epsilon = \frac{r - r_0}{r_0} \quad (10)$$

ahol r az oldott r_0 pedig az oldó fém atomjainak sugara, „ c ” pedig a szilárd oldat koncentrációja.

A 8. összefüggés érvényes akkor, ha a „ c ” koncentráció nagyobb, mint 10^{-2} , míg a 9. összefüggés adja meg az eredményt, ha a koncentráció 10^{-2} – 10^{-3} közé esik.

Ha megnézzük egy olyan ötvözőrendszer folyáshatárát a koncentráció függvényében, mely minden koncentrációnál azonos kristályszerkezetű szilárd oldatot képez, olyan görbét kapunk, mint amilyent az 5. ábra szemléltet. Ez világosan mutatja, hogy csak kis koncentrációknál érvényesülhet a 8. és 9. összefüggés, mely a koncentrációtól lineárisan, ill. $4/3$ -os hatvány szerint függ.

Fleischer [19] az alábbi összefüggésre jut:

$$\sigma_c = AG\epsilon^{3/2}c^{1/2} \quad (11)$$

ahol „ A ” az anyagtól függő állandó.

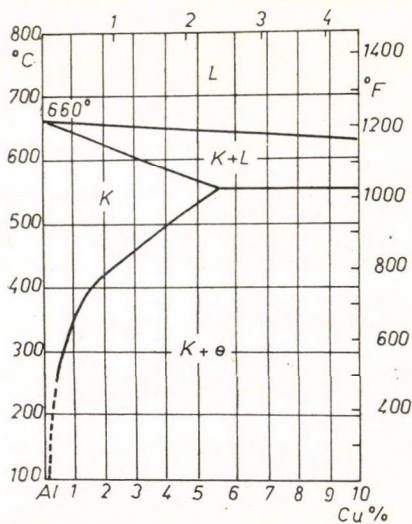
Az oldott atomok folyáshatárt növelő hatásának a becslésénél számításba kell venni azt, hogy az ϵ értéke nem lehet nagyobb, mint 0,15. Ugyanis Hume—Rothery²⁰ tapasztalati törvénye szerint a szilárd oldat ennél nagyobb fajlagos atomátmérő különbségnél csak nagyon szűk koncentráció tartományban jöhet létre. Ennek megfelelően, ha ϵ -ra 0,1-et, „ c ”-re pedig 0,5 értéket veszünk, akkor a szilárd oldat képződéséből eredő folyási határ növekedése a 8. kifejezés szerint

$$\sim 10^{-3} G$$

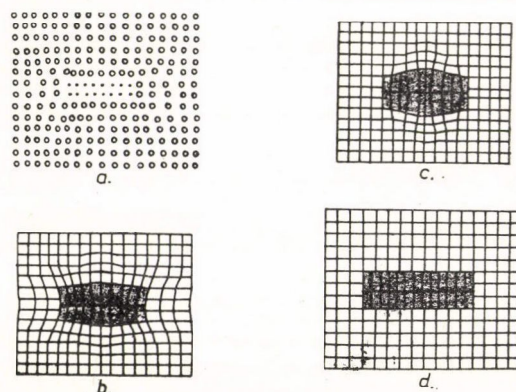
a szubsztitúciós szilárd oldatokra.

Itt meg kell jegyezni azt is, hogy a térben középpontos köbös kristályszerkezetű interszticiós szilárd oldatokban az ϵ értéke megközelíti az egységet. Így ezekben a szilárd oldatokban a folyási határ azonos koncentráció értéknél közel két nagyságrenddel lenne nagyobb, mint a szubsztitúciós szilárd oldatoké. Ez lenne a leghatásosabb folyási határt növelő lehetőség akkor, ha az interszticiós szilárd oldatok maximális koncentrációja nem lenne túl kicsi. A műszaki fontosságú vasban pl. a szénatomok maximális oldhatósága szobahőmérsékleten nem éri el a 0,01 %-ot. Sajnos ez a korlátozás ezt a csábító lehetőséget kizárja.

ad d) A kiválasztott keményíthető ötvözetek általános jellemzője, hogy egyik alkotójuk oldhatósága a hőmérséklet csökkenésével csökken. A 6. ábra egy jellegzetes ötvözet az Al-Cu rendszer állapotábrájának azt a részletét mutatja, mely arra a koncentrációra korlátozódik, melyben a kiválás hatá-



6. ábra



7. ábra

sosan megvalósítható. Megfelelő hőkezeléssel az ilyen ötvözetekben Al_2Cu vegyület keletkezik, melynek mennyiségét a C koncentráció, krisztallitjainak méretét és eloszlását pedig a hőkezelés szabja meg. A 7. ábra vázlatosan mutatja, hogy a kiválás milyen változásokon megy át a hőkezelés során.

Közvetlenül a gyors hűtés után a GP-I zónának nevezett tartományok keletkeznek²¹, melyek 1—2 réteg vastagságúak Cu atomokból állnak az alapanyag $\{100\}$ síkjai mentén helyezkednek el és átmérőjük kb. 25 Cu atom. A további hőtartás során ebből alakul ki a GP-II-nek nevezett tartomány, mely a 7b ábrán látható. Ennek mérete az előbbinél valamivel nagyobb, kémiai összetétele pedig az Al_5Cu_3 képletnek felel meg. A következő metastabil fázis a θ' már megfelel az Al_2Cu kémiai összetételnek, de tetragonálisan torzult az egyensúlyi θ fázishoz képest.

Az eddig említett négyféle képződmény közül az első háromnak két jellegzetessége van. 1. Metastabil tartományok, 2. koherens, vagy közel koherens határt képeznek az alapötvözzel. Ez a koherens összefüggés nagymértékben, de rugalmasan torzítja a rácsot és elsősorban ez az oka a folyási határ növekedésének. Az ilyen ötvözetekben a diszlokációk mozgásának az a leglényegesebb vonása, hogy azok átmetszik az eddig említett három tartományt, mivel a koherens kapcsolat az alapötvözet és a metastabil tartományok között fenntartja a csúszósíkok folyamatoságát.

Bár amit eddig elmondtam, az az Al-Cu ötvözetre vonatkozott, de lényegében hasonló folyamat megy végbe valamennyi kiválásosan keményíthető ötvözetben. Mindegyikben megtaláljuk a GP-I és a GP-II zónát, valamint a metastabil semi-koherens határú fázist is.

Ezek a tartományok a folyási határt *Mott* és *Nabarro* [18] szerint az alábbi módon növelik:

$$\sigma_p = 2G\epsilon c \quad (12)$$

Ami a számszerű értékeket illeti, a 12. és a 8. egyenlet összevetésével azonnal kiderül, hogy a kiválások lényegesen nagyobb folyási határ növekedést okoznak, mint az oldott atomok. Már a kétszeres szorzó is megduplázza a hatást és ez tovább nő egy nagyságrenddel annak következtében, hogy az ϵ fajlagos méretkülönbség nem a második, hanem az első hatványon szerepel. Így a kiválásosan keményített ötvözetekben a folyási határ növekedése

$$\sim 10^{-2} G$$

nagyságúra becsülhető.

ad e) Eddig alig esett szó a 7d ábráról, ami az egyensúlyi Al_2Cu fázist vázolja. A másik három előbb tárgyalt tartományhoz képest az a döntő különbség, hogy ennek a fázisnak a határa inkoherens. Ez azt jelenti, hogy az alumíniumlapú rézet tartalmazó szilárd oldat csúszósíkjai nem folytatódnak az Al_2Cu alaplapon közép-pontos tetragonális fázis valamely kristálytani síkjában és ezért a diszlokációk az alakváltozásnál nem tudják az ilyen fázist átmetszeni. Egy másik lényeges különbség pedig az, hogy ez a fázis egyensúlyi fázis, már amennyire egy szilárd test egyensúlyi állapotban lehet. Az ilyen részecskéket nem kiválásnak, hanem diszperz részecskéknak tekintjük. Ez a megkülönböztetés azért fontos, mert a diszperz részecskéék más mechanizmussal növelik a szilárdságot, mint a kivált részecskéék. Az ilyen diszperz fázissal keményített ötvözetekben a második fázis rendszerint valamilyen kemény fémoxid. Egy jellegzetes ilyen ötvözet az Al- Al_2O_3 vagy a Cu- Al_2O_3 . A diszperziósan keményíthető ötvözeteket rendszerint porkohászati úton vagy belső oxi-

dációval állítják elő. Az első esetben a finom oxidport az alapfém porával keverik össze és így zsugorítják. A belső oxidáció pedig abból áll, hogy olyan ötvözetet készítenek, melyben az egyik alkotó a későbbi diszperz fázisnak egyik eleme. A szokásos kohászati úton előállított ilyen ötvözetet oxigénnel telítik, miközben kialakul a diszperz oxid. A diszperziósan keményített ötvözetek közé soroljuk az egyébként kiválásosan keményíthető ötvözeteket is akkor, ha azok túl öregbített állapotban vannak, ahogy ezt tettük az Al_2Cu esetében is.

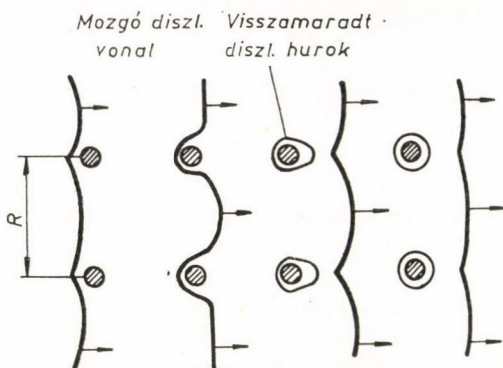
A diszperz részecskéket tartalmazó ötvözetekben a diszlokációk mozgását *Orowan* [22] írta le. Ezt a mechanizmust mutatja a 8. ábra. A diszlokációk a diszperz részecskék között csak úgy tudnak áthaladni, hogy minden részecske körül egy teljes diszlokációs hurok marad hátra. A képlékeny alakváltozás megindulását az a feszültség szabja meg, mely a diszlokációt két szomszédos részecske között át tudja

kényszeríteni. Így a diszperz részecskék hatására bekövetkező folyási határ növekedés *Orowan* szerint

$$\sigma_d = \frac{Gb}{R} \quad (13)$$

ahol „ R ” a részecskék közötti távolság. Feltéve, hogy ezt a távolságot 10^{-4} mm-re sikerül csökkenteni, mely nagyon finoman diszpergált részecskéket jelent, az így elérhető szilárdságnövekedés

$$\sim 10^{-3} G$$



8. ábra

het érni, az ilyen ötvözeteknek mégis nagy a jelentőségük, mert nagy hőmérsékleten is terhelhetők (kivéve a kiválásokkal létrehozott diszperziós ötvözeteket) annak veszélye nélkül, hogy a részecskék eldurvulnának, ami az „ R ” növekedésével és a folyási határ csökkenésével járna.

ad f) A diffúzió nélküli, vagy martenzites átalakulásokra az jellemző, hogy az ilyen folyamatokban az atomok csak nagyon kis elmozdulást végeznek a szomszédjaikhoz képest. Ezért rendszerint gyorsan mennek végbe. Ezenkívül a régi és az új fázis fajtérfogata különböző. A fajtérfogat különbségből eredő eltéréseket, vagy a képlékeny alakváltozás, vagy ikerképződés csökkenti, de nem szünteti meg. Ezért az új fázist külső igénybevétel nélkül is nagy rugalmassági feszültségek terhelik.

A diffúzió nélküli átalakulás új fázisának a koncentrációja azonos az eredetivel, mert nincs diffúzió. A szilárdságnövelésben fontos szerepe van annak a ténynek is, hogy a martenzites átalakulásnál az új fázis krisztallitjai rendkívül finomak. Így az ilyen átalakulásokban az előzőekben már említett hatások közül több is szerephez jut:

1. a finom szemcseméret,
2. a képlékeny alakváltozás okozta diszlokáció-sűrűség növekedése,
3. az oldódási keményedés,
4. az ikerképződés.

Az első három hatást a korábbiakban már tárgyaltuk. Az ikerképződésről ugyan nem esett szó, de annak hatása a krisztallithatárokéhoz hasonló, mert az ikerhatárokon is megváltozik a kristályok orientációja és ennek következtében ott a diszlokációk ugyanúgy feltorlódnak, mint a krisztallithatárokon.

Külön ki kell emelni az oldódás okozta keményedésnövekedést. Már korábban említettem, hogy az interstíciós atomok, mint amilyenek a C és N a térben közép-pontos köbös kristályokban sokkal nagyobb keményedést okoznak, mint a szubsztitúciósok. Normális körülmények között azonban ezek koncentrációja elhanyagolható. A martenzites átalakulás azonban lehetővé teszi, hogy pl. a C-atomok koncentrációját két nagyságrenddel megnöveljük az egyensúlyi koncentrációhoz képest, az új martenzites fázisban. Ez az egyik oka a vasalapú ötvözetekben a martenzit rendkívül nagy folyási határának.

A nagy keménység másik oka az, hogy helyi kis tartományokra kiterjedően nagy képlékeny alakváltozás megy végbe. Ennek következtében a diszlokáció-sűrűséget minimálisan 10^{12} cm^{-2} -ra becsülik. (Machlin [23]) Ami azt jelenti, hogy az ebből eredő keménység nagyobb, mint amit a korábbiakban a diszlokációk sűrűségének a hatására $10^{-2} G$ -re becsültem. Ha az interstíciósok koncentrációjának a megnövekedését, a diszlokációk nagy sűrűségét és a szemcsék elaprózódását az ikerképződéssel együtt számításba vesszük, a martenzites átalakulás folyási határ növekedését a vasalapú ötvözetekben

$$\sigma_m \sim 10^{-1} G - 10^{-2} G\text{-re}$$

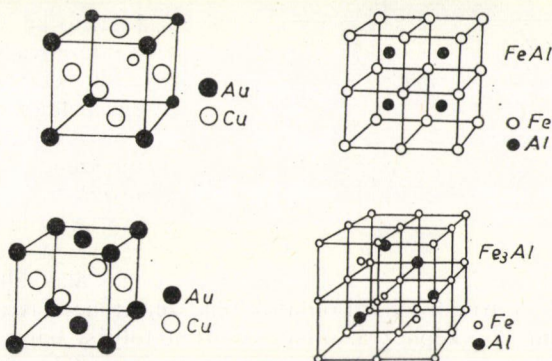
becsülhetjük. Ez közel jár az elméleti folyási határ értékéhez.

Ha azonban meggondoljuk, hogy a vas tűkristályain 1300 kp/mm^2 folyási határt mértek és az ún. maraging acélok szilárdsága [24] az 500 kp/mm^2 nagyságot is eléri, akkor kiderül, hogy a fenti becslést a gyakorlati eredmények megerősítik.

Az előbbiekhöz annyit még hozzá kell tenni, hogy az ötvözetlen martenzit sokkal kisebb feszültségnél ridegen törik. Véleményem szerint ez annak következménye, hogy a nagyon nagy diszlokáció-sűrűségű tartományokban Cottrell-féle hasadási diszlokációk keletkeznek [12]. Az ezzel járó ridegtörékenységet kellene valamilyen módon csökkenteni.

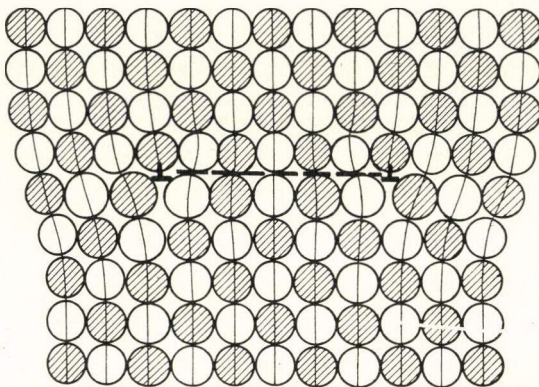
A martenzites átalakulásokkal kapcsolatban annyit még meg kell jegyezni, hogy az nem csupán a vasalapú ötvözetekben fordul elő. Egyre több olyan ötvözetet ismertetnek, melyben a martenzites átalakulás végbemegy és amelyek egytalanál nem tartalmaznak vasat. Ezek között ismerünk olyan martenzites átalakulást, melynél a martenzites fázis lágyabb mint amiből keletkezett. Ezeknek azonban egyelőre inkább elvi a jelentőségük. Kétségtelen, hogy a gyakorlati hasznosításban a vasalapú ötvözetek a legfontosabbak.

ad g) Nézzük most a rendezett rácsú szilárd oldat folyási határt növelő szerepét. Az ilyen



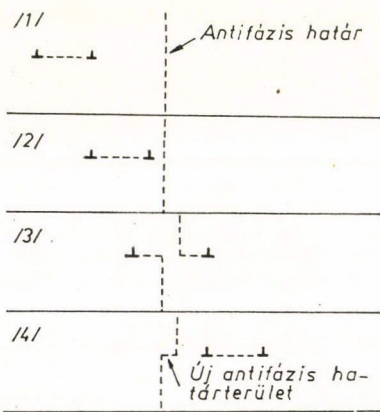
9. ábra

szerkezetekre, mint amilyenek a 9. ábrán is láthatók az jellemző, hogy bennük a különböző fajtájú atomok nem statisztikusan, hanem meghatározott rendben helyezkednek el. Az ilyen rendezett szerkezet alacsony hőmérsékletű képződmény olyan értelemben, hogy egy bizonyos hőmérsékleten amit Curie-hőmérsékletnek neveznek, a szerkezet a hevítésnél normális szilárd oldatra esik szét. Minél nagyobb



10. ábra

amint azt a 10. ábra mutatja. Ezt a rácshibát nevezzük szuperdiszlokációnak. A \perp jellel megadott két diszlokáció között szaggatott vonallal jelöltük meg a rendezett rácscsú szilárd oldatokra jellemző antifázis határt, mely nem más mint két olyan rendezett tartománynak közös felülete, ahol az ideális rend csak egy olyan vékony



11. ábra

dezettrácsú szilárd oldatok rendszerint nem is alakíthatók, ridegen törnek. Az általános képhez azonban az ilyen folyási határ növekedés is hozzátartozik. A folyási határ növekedését elsősorban a rendezett tartományok határainak a felületi energiája szabja meg. Az ilyen szerkezetben a diszlokációk mozgathatóságához szükséges

egy rendezett szerkezetnek a Curie-hőmérséklete, annál nagyobb a rendeződést létrehozó kölcsönhatási energia. Sok esetben ez olyan nagy, mint pl. az AgMg vagy az AuZn ötvözeteknél, hogy a rendezett rács az olvadáspontig megmarad.

A rendezettrácsú szilárd oldatok folyási határának a megszabásában nagy szerepe van annak, hogy az ilyen szerkezetekben a diszlokációk Burgers-vektora sokkal nagyobb, mint az ugyanolyan szerkezetű normális szilárd oldatokban, vagy pedig két diszlokáció szoros kapcsolatban áll egymással,

amint azt a 10. ábra mutatja. Ezt a rácshibát nevezzük szuperdiszlokációnak. A \perp jellel megadott két diszlokáció között szaggatott vonallal jelöltük meg a rendezett rácscsú szilárd oldatokra jellemző antifázis határt, mely nem más mint két olyan rendezett tartománynak közös felülete, ahol az ideális rend csak egy olyan vékony rétegben nem valósul meg, mely két atomátmérő vastagságú. Ez a két diszlokáció szorosan összetartozik [25] és egymástól csak úgy távolodhat el, ha az antifázis határ felülete megnő, ami növeli a rendszer belső energiáját. Ezt pedig a külső feszültség munkája végzi el. Ez a helyzet hasonló ahhoz, mint amikor a felületen középpontos köbös kristályokban az egységnyi diszlokáció két Schockley parciálisra bomlik. Így a rendezettrácsú szilárd oldatokban az ábrán megadott két diszlokáció együtt mozog, ahogy ezt egy példán a 11. ábra mutatja. Ezen látható, hogy amikor a diszlokációk egy antifázis határt metszenek, akkor annak felülete megnő. Ez is hozzájárul a folyási határ növekedéséhez.

A szilárdságnövelés másik oka az, hogy a rendezett rács kialakulásával rendszerint rugalmas alakváltozás is jár. E két ok miatt a ren-

feszültségnek a kiszámítására Cottrell [26] adta meg az alábbi kifejezést:

$$\sigma_r = \frac{2\gamma}{l} \left(1 - \frac{3t}{l} \right) \sim \frac{2\gamma}{l} \quad (14)$$

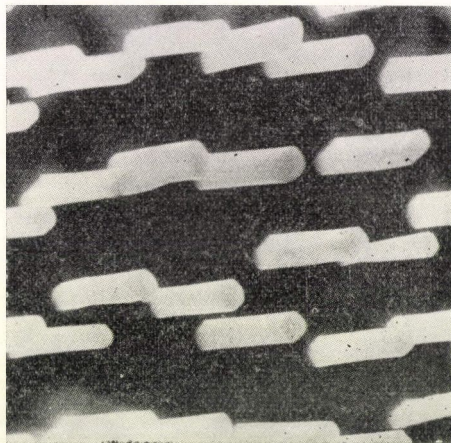
Itt γ a rendezett tartomány felületi energiája, l a rendezett tartomány mérete és t pedig az antifázishatár vastagsága. Ha pl. a β sárgaréz megfelelő adataival a folyáshatárt kiszámoljuk, akkor a rendeződés okozta folyási határhoz jutunk, melynek nagysága

$$\sim 10^{-3} G$$

Ez azonban a rendezett tartomány méretétől erősen függ.

Az előbbieken áttekintettük azokat a folyási határt növelő eljárásokat, melyeket alapos kutatási eredményekre támaszkodva a mindennapi gyakorlatban általánosan használnak. A következőkben egy olyan kutatási irányt ismertetek, mely mintegy 4–5 éves múltra tekint és azzal a céllal indult, hogy az ideális szilárdságú tűkristályokat hasznosítsa. Az ilyen néhány mikron átmérőjű és 2–3 cm hosszú kristályokat méretük miatt gyakorlati célokra felhasználni nem lehet. Ennek a nehézségnek a kiküszöbölésére jelenleg két irányban végeznek kutatásokat.

Az egyik szerint a tűkristályokat egy alacsonyabb olvadáspontú fémbe ágyazzák. Itt az a cél, hogy a kisebb olvadáspontú fém tartsa össze a nagyszilárdságú tűkristályokat, melyeknek a terhelést kellene hordania. Az ilyen anyagok előállításával sok nehézség jár annak ellenére, hogy a tűkristályok tömeges előállítását megoldották. A beágyazás helyes elvégzése, valamint a beágyazófém és a tűkristályok közötti kölcsönhatás okozza a problémát.



12. ábra

A második megoldás szerint eutektikus ötvözetrendszert irányítottan kristályosítanak. Egy ilyen rendszerben az eutektikum egyik fázisa a kisebb mennyiségű és nagyobb szilárdságú, hosszú tűk alakjában kristályosodik, a másik fázis pedig ezt veszi körül. Egy ilyen szerkezetű ötvözet elszakított felületét mutatja a 12. ábra [27]. Itt a sötét alapanyagból kiálló sörték TiZn_{15} képletű intermetallikus vegyület kristályok, míg a sötét alapanyag kevés titánt tartalmazó Zn.

Bár a folyóiratok az ilyen irányú kutatások egyre több eredményéről számolnak be, a gyakorlati felhasználást eddig még nem sikerült megoldani, (legalábbis a folyóiratirodalomban nem közölték) bár az a néhány éves kutatás, amit eddig lefolytattak, sok reményre jogosít.

Mielőtt a bemutatott eredményeket összehasonlíthatnánk, a folyási határ növelésének az előzőekben felsorolt lehetőségeivel kapcsolatban meg kell említeni azt, hogy azok, az oldódás, a diszperzió és a rendezettrács kialakulását kivéve, olyan

folyamatok, melyek az anyagnak mint termodinamikai rendszernek a metastabilitását növelik. Legyen a metastabilitás az a ΔF szabadenergia többlet, amit a tényleges állapot F_f és az ideális egyensúlyi állapot F_i szabadenergiák különbségeként kapunk. Az előbbi felsorolásból kimaradt lehetőségek kihasználása egyúttal azt is jelenti, hogy a folyási határ növelésével együtt jár a ΔF metastabilitás növekedés. Ezért ezeket a lehetőségeket csak akkor szabad használni, ha a szerkezeti anyagot csak viszonylag alacsony hőmérsékleten tartjuk. Ez a hőmérséklet kb. $0,3 T_{op}$ ahol

II. TÁBLÁZAT

	Folyási határ
Elméleti	$3 \cdot 10^{-2} \text{ G} - 3 \cdot 10^{-1} \text{ G}$
Egykristályok	$10^{-5} \text{ G} - 10^{-3} \text{ G}$
A képlékeny alakítás okozta keményedés	10^{-2} G
A szemcseméret hatása	10^{-3} G
Az oldott atomok hatása	10^{-3} G
A kivált szemcsék hatása	10^{-2} G
A diszperz szemcsék hatása	10^{-3} G
A martenzites átalakulás hatása	$10^{-2} \text{ G} - 10^{-1} \text{ G}$
A rendezettrácsú szilárd oldat hatása	10^{-3} G

T_{op} a Kelvin fokokban mért olvadáspont. Természetesen ez csak tájékoztató jellegű érték, ami a metastabilitás mértékétől nagymértékben függ. Minél nagyobb a metastabilitás mértéke, annál kisebb az a hőmérséklet, melyen az anyag tulajdonságai változatlanok maradnak.

A metastabil állapotú anyagokban termikus gerjesztés hatására, olyan folyamatok mennek végbe, melyek az egyensúlyi állapot felé tolják el a rendszert. Ez természetesen a mechanikai tulajdonságok változására, a legtöbb esetben a folyási határ csökkenésére vezet. Ez az oka annak, hogy a metastabilitás növelésével létrehozott növelt folyáshatárú anyagok csak gondosan körülhatárolt, viszonylag alacsony hőmérsékleten terhelhetők.

Ezek után összehasonlítjuk a különböző szilárdságnövelő eljárásokat, hiszen az elmondottakból láttuk, hogy melyiktől milyen szilárdságnövekedés várható. Az áttekintés megkönnyítése érdekében állítottuk össze a II. táblázatot. Ebből kiderül, hogy a legnagyobb szilárdságnövekedést a martenzites átalakulás okozza. Ezután következik a képlékeny alakváltozás és a kiválások hatása, és csak ezeket követik a többi eljárások. Ebből a néhány adatból az is következik, hogy a martenzites átalakulás, a képlékeny alakváltozás és a kiválások tanulmányozása és kutatása kecssegtet a legnagyobb eredménnyel. Az eddigi kutatások alapján pedig várható, hogy — legalábbis a vasalapú ötvözeteknél — az elméleti folyáshatárnak kb. a negyedét laboratóriumi eredményként 10—15 éven belül elérik.

IRODALOM

1. Griffith A. A., Phil. Trans. Roy. Soc. (London) A221 163, 1920.
2. Frenkel J., Z. Physik, 37 572, 1926.
3. Orowan E., Z. Physik, 89 634, 1934.
4. Polányi M., Z. Physik, 89 660, 1934.
5. Taylor G. I., Proc. Roy. Soc. (London) A145 362, 1934.
6. Gyulai Z. Z. Physik, 138 317, 1954.
7. Brenner S. S.: Growth and Perfection of Crystals, Wiley 157 old. 1958.
8. Gilman J. J., J. Appl. Phys. 30 1584, 1959.
9. Seeger A.: Electron Microscopy and Strength of Crystals Interscience New-York 14. fejezet 1963.
10. Kocks U. F., H. S. Chen, D. A. Rigney, and R. J. Schaffer, Work Hardening, Gordon and Breach Sci. Publ. New-York, 151 1968.
11. Cottrell A. H., Trans A. I. M. E. 212, 196, 1958.
12. Prohászka J.—Tóth I., Acta Technica Academiae Scientiarum Hungaricae; Tomus 64 (3—4), pp. 443—453, 1969.
13. Petch N. J., J. Iron and Steel Inst. 173 25, 1953.
14. Koehler J. S., Phys. Rev. 85 480, 1952.
15. Stroh A. N., Proc. Roy. Soc. (London) 223, 404, 1954.
16. Dieter G. E., Mechanical Metallurgy, Mc Graw-Hill 189, 1961.
17. Verő J., Kohászati Lapok 100 193, 1967.
18. Mott N. F., and F. R. N. Nabarro, Strength of Solids Phys. Soc. (London) 1, 1948.
19. Fleischer R. L., The Strengthening of Metals, Reinhold Publ. New-York, 121, 1966.
20. Hume-Rothary W., Elektronok, atomok, fémek és ötvözetek Akadémiai Kiadó, Budapest, 311, 1955.
21. Kelly A. and Nicholson R. B.: Progress in Materials Scienc Pergamon Press New-York No 10 3. 1963.
22. Orowan E., Symposium on Internal Stresses, Institute of Metals London 457, 1947.
23. Machlin E. S., The Strengthening of Metals, Reinhold Publ. 216, 1964.
24. Contractor G. P., Cobalt 33 187, 1966.
25. Koehler J. S. and F. Seitz. J. Appl. Mech. 14 217, 1947.
26. Cottrell A. H., Relation of Properties to Microstructure Am. Soc. Metals 1954.
27. Koda S., Jeol News, 8M 20, 1970.

NÉHÁNY IPARILAG FONTOS SZÍNESFÉM FIZIKÁJÁNAK IDŐSZERŰ KÉRDÉSEI

STEFÁN MIHÁLY

Csepeli Fémmű

Bevezetés

Az utóbbi évtizedekben a fizika, kémia, metallurgia, fémtan sikerei lehetővé tették nagy számú új, különleges fizikai és mechanikai tulajdonsággal rendelkező fémes szerkezeti anyag ipari méretű alkalmazását és ezáltal a technika gyorsuló ütemű fejlődését.

A fémes szerkezeti anyagok köre és a különböző tulajdonságokkal szemben a felhasználó iparágak, elsősorban a mérés-, automatizálás-, számítás- és híradástechnika, által támasztott követelmények állandóan növekvő tendenciával változnak.

Ezért a színesfém szerkezeti anyagok előállítás, az alkalmazás problémái és ezek megoldásának a tudományos technikai jelentősége hazánk ipari fejlődésében is állandóan növekszik.

Az iparilag alkalmazott fémek és ötvözetek köre napjainkban már az egész periódusos rendszer fémeire kiterjed. Ezért szükséges a fémek szerkezetének és tulajdonságainak mind mélyebbreható megismerése, amihez az elméleti törvényszerűségek feltárása útján juthatunk el.

A fémfizika egyik alapvető célja olyan új kísérleti törvényszerűségek feltárása és elmélet kidolgozása, amelyek végeredményben majd lehetővé teszik az előre meghatározott fizikai és mechanikai tulajdonságú fémes szerkezeti anyagok számításokkal történő megtervezését és előállítását.

(Bizonyos eredmények e téren már ismeretesek, mint pl. a villamosvezetőképesség.)

Bármely fém és ötvözet ipari méretű felhasználását az alábbi fontosabb tényezők befolyásolják:

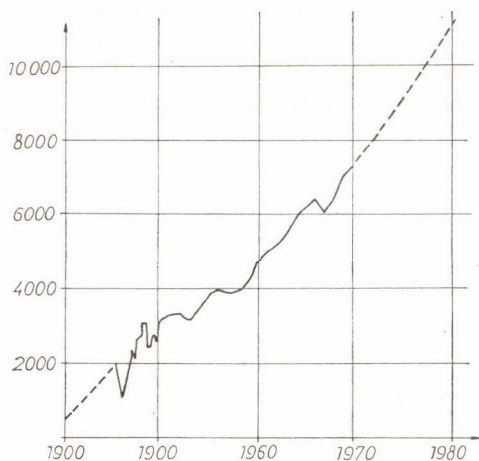
- a) fizikai, mechanikai és technológiai tulajdonságok,
- b) az alkalmazási területei és az új gyártmányok fejlődése,
- c) milyen áron és mértékben áll a felhasználók rendelkezésére,
- d) helyettesíthetősége más fémekkel, illetve anyagokkal.

A tanulmány célja, a fémfizika, valamint a fémes szerkezeti anyag előállítás és alkalmazás hazai eredményeire alapozva megkísérelje megszerezni és összefüggéseiben ismertetni a közeljövő fejlődés irányait és felhívni a figyelmet néhány hazai vonatkozású időszerű feladatra.

A következőkben a fenti tényezőket figyelembe véve a hazai iparban fontos tiszta fémek közül a Cu és Mo fizikájának néhány kérdését szeretném ismertetni.

A tiszta réz

A réz az ember által legrégebben és a legnagyobb mennyiségben használt fémek közé tartozik. Alkalmazási lehetősége sajátos tulajdonságai (villamos és hővezetőképesség, alakíthatóság, forraszthatóság, korrózióállóság) következtében igen széleskörű. Egyrészt ezzel magyarázható a világ tiszta (vagy ún. finomított) réz felhasználásának az alakulása, amelyről az 1. ábra tájékoztat.



1. ábra. A világ finomított réz felhasználásának alakulása (1000 t-ban)

1969-ben a világ rézfelhasználása több mint $7 \cdot 10^6$ tonna volt, ami az egyes országok közt nagyon egyenlőtlenül oszlik meg. Az iparilag fejlett országokban (USA, Anglia, NSZK, Kanada) az évi rézfelhasználás 9–12 kg/fő. Több adat szerint ez a felső határt már megközelíti. A KGST országokban 3–6 kg/fő, hazánkban 1969-ben 3,5 kg/fő, míg a fejlődő országok rézfelhasználása csak 10^{-2} – 10^{-1} kg/fő évenként (1–3).

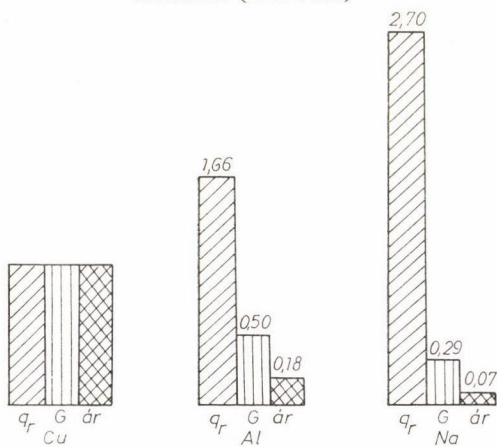
Ezekből az adatokból megállapítható, hogy az ipar fejlődése az élet színvonal emelkedése a rézfelhasználás növekedését eredményezi. A világ rézérckészleteit több száz millió tonnára becsülik, tehát az elkövetkező évtizedek növekvő igénye biztosítottnak látszik.

A réz egyik legfontosabb alkalmazási területe az erős- és gyengeáramú elektrotechnika, amely az összes termelt mennyiség 50%-át (hazánkban kb. 15 000 tonnát) használja fel vezető céljaira.

E területen azonban az alumínium megjelent versenytársként. A 2. ábra az Al és Na villamos vezetékanyagok jellemzőinek és árának a Cu-val való összehasonlítását mutatja. Az adatok jelzik, hogy az Al mellett az Na új potenciális versenytársként jelenhet meg.

A polietilénnel együtt sajtolt Na vezetékek előállításának költsége jelentősen kisebb, mint az alumíniumé (4). Ez a fejlődési irányzat még nem érvényesült, de mint lehetőséget célszerű figyelembe venni.

A réz helyettesítése más fémekkel, illetve anyagokkal műszaki és gazdasági tényezők által vezérelt folyamat. Egyes területeken a réz szerepe csökken (pl. nagy-



2. ábra. Cu, Al és Na villamos vezetékanyagok relatív keresztmetszetének (q_r), súlyának (G) és árának összehasonlítása

feszültségű távvezetékek), máshol viszont jelentősen növekszik. Az erősáramú elektrotechnikában az alumínium bizonyos előnye vitathatalan, de az elektronikában a réz várhatóan a jövőben is uralkodó marad, tekintettel a kedvező fizikai és technológiai tulajdonságokra, mérettényezőire, illetve a miniaturizálási törekvésekre.

Napjainkban a távközlési vezetékek fejlődése az egyszerű érpártól a koaxiális kábeleken keresztül a hullámvezető rendszerekig terjed. A koaxiális kábel hálózatok és a hozzájuk csatlakozó berendezések sokféle híradástechnikai szolgáltatásra nyújtanak lehetőséget (pl. közös tv-antenna, kiegészítő tv-hálózatok, képtelefon, távmérés, az egyes számítógépek közötti adatsere stb. (5.) Ezért hazánkban is tovább kell fejleszteni a koaxiális kábelek gyártását és ki kell dolgozni a megfelelő tulajdonságokkal rendelkező anyagokat, köztük a tiszta rézből készült, kis felületi hiba koncentrációjával és nagy méretpontossággal rendelkező szalagokat. A számítógép huzalmemóriák vezető maganyagához használt réz huzalok felületének szerkezeti problémája hasonlóan fontos kérdés.

A réz jelentős részét zománc szigetelésű huzalként tekercselési célokra használják. A huzal torziója következtében a tekercsek alakja megváltozik. Ennek oka a zománczott huzalok „visszarugózása”.

A jelenséget több tényező befolyásolja, amelyek közül a zománc hatása sem elhanyagolható, azonban főként a rézhuzal újrakristályosodási hőmérsékletével és folyáshatárával jellemezhető tulajdonságai befolyásolják.

Ismeretes, hogy a fentiek jellemzésére használatos „visszarugózás” mértéke nemcsak a szennyező elemek mennyiségétől függ, hanem az alakítás és főleg a hőkezelés körülményeitől is (6, 7).

A tekercselési célokra alkalmas anyag, illetve huzal minőség vizsgálatára Európában elterjedt a rugómegnyúlás, vagy RM szám meghatározás módszere (8). Alapgondolata: egy szorosan tekercselt rugó adott terhelésre megnyúlik és a mértéke összefüggésben van a huzal lágyágával. Ez a vizsgálati módszer közelíti meg leginkább a tekercskészítés viszonyait.

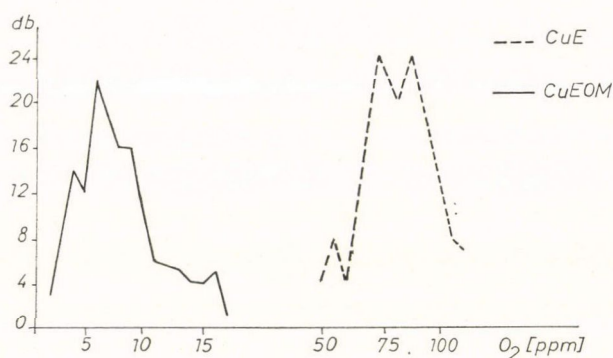
Hazai kutatási eredmények (8) és irodalmi adatok alapján megállapítható, hogy a rugómegnyúlás mértéke a szennyező tartalomra érzékenyebb, mint a vezetőképesség, de alapvetően fontos a gyártás körülményeinek a hatása is, mert ettől függ az oldatban maradó szennyezők mennyisége.

Az irodalomban sem ismert olyan elméletileg megalapozott és megbízható vizsgálati módszer, amely lehetővé tenné a gyártás megfelelő fázisában (melegalakítás és az első hőkezelés után) a tekercselési célokra felhasználásra kerülő anyagok minősítését, illetve a gyártás megfelelő ellenőrzését.

A tiszta réz fizikájára vonatkozó közlemények egy része, a huzalhúzás közbeni folyamatos lágyítás bevezetése és a zománc szigetelésű huzalgyártás problémáinak a megoldása érdekében az újrakristályosodás kinetikáját és a szennyező tartalom hatását tárgyalja [9–12].

Egységes a vélemény a szilárd oldatban maradó szennyezőknek az újrakristályosodási folyamatokat gátló szerepéről. Több szennyező elem „kollektív” hatása nem nagyobb, mint az oldatban levő legnagyobb hatású egyedi elemé. Kvantitatív összefüggés a szennyezők kollektív hatására vonatkozóan egyelőre nem ismert.

Az MTA Központi Fizikai Kutató Intézetében a réz összszennyezés koncentrációjának meghatározására kidolgozott mag mágneses rezonancia (MMR) módszer [13] felhasználásával eljuthatunk az ismertetett probléma megoldásához, mert az



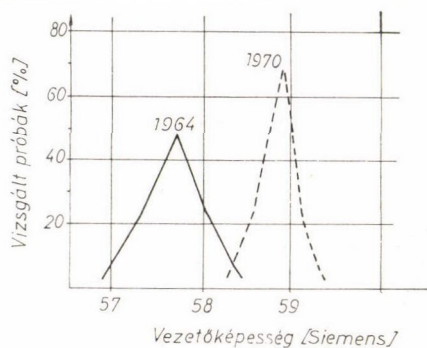
3. ábra. Réz félgyártmányok oxigén tartalma

éppen a mátrixszal szilárd oldatot képező szennyezők mennyiségének a meghatározására alkalmas. A MMR módszert felhasználva összefüggéseket kereshetünk az RM szám, az aktív összszennyező tartalom, továbbá az újrakristályosodási hőmérséklet, szemcseméret és a rugalmassági modulusz között. A [8] és [13] hivatkozásokban idézett munkák folytatása nagyjelentőségű elméleti és gyakorlati eredményeket ígér.

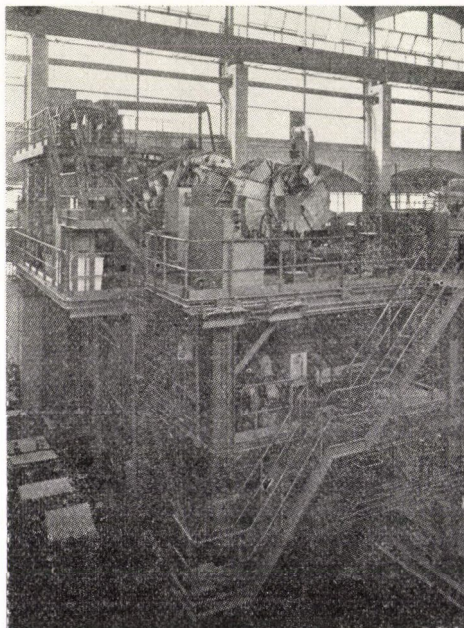
Ismert, hogy minden szennyező elem rontja a vezetőképességet, ezért is általános törekvés a réz tisztaságának növelése. Az egyre szélesebb körben felhasználásra kerülő oxigénmentes réz minőségek összes szennyező tartalma 50–200 ppm nagyságrendű.

A hazai ipar fejlődése szempontjából nagy jelentőségű a Csepeli Fémműben megvalósított oxigénmentes réz gyártása, amelynek évi értéke közel 1,5 milliárd Ft. Ezáltal a felhasználó ipar a világszínvonalnak megfelelő minőségű réz alapanyagot dolgozhat fel. Az elért fejlődés jellemzésére bemutatom a 3. ábrán az oxigéntartalom gyakoriságát és a 4. ábrán a vezetőképesség gyakoriságát 1964 és 1970 évre vonatkozóan.

Ezzel szemben a Csepeli Fémműben gyártott 99,99% tisztaságú réz vezetőképessége 59,4–59,65 Ohm mm²/m közt változik. Az 5. ábrán az oxigénmentes réz olvasztó és folyamatos öntőberendezése



4. ábra. Vezetőképesség változás a hazai réz gyártmányoknál



5. ábra. A Csepeli Fémmű oxigénmentes réz olvasztó és folyamatos öntőberendezése

1. TÁBLÁZAT

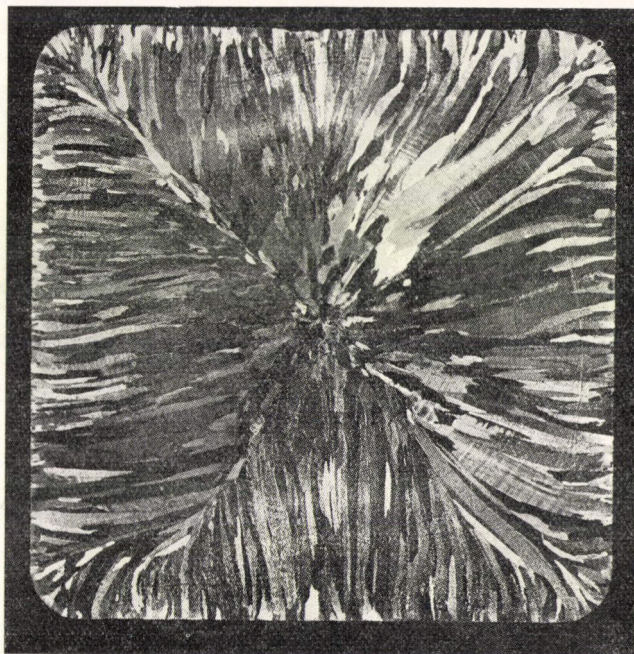
Anyag	Relatív keresztmetszet* Relatív ár		
	szoba hőm. (300 K°)	H. hőm. (20,4 K°)	He. hőm. (4,2 K°)
Al 99,999	2380 2400	2,14 2,2	1 1
Al 99,9	2380 650	41,7 12	39,5 11
Cu wirebar	1550 4000	8,26 22	7,21 19
Cu 99,99	1500 5700	1,74 6,5	0,79 3
Na	4190 260	16,9 1,1	1,62 0,10

* azonos hossz és ellenállás esetén

dezés látható, a 6. ábra a Csepeli Fémműben gyártott CuE-OM huzalhengerlési tuskó makro-kristályszerkezetét mutatja.

A krioelektrotechnika fejlődése fontossá teszi a tiszta fémek alacsony hőmérsékleteken mért vezetőképességét. Az 1. táblázat a különböző tisztaságú Al, Cu és Na relatív keresztmetszetének (azonos hossz és ellenállás esetén) és árának az alakulását mutatja be különböző hőmérsékleteken. Az adatokból kitűnik az alacsony hőmérsékleteken elérhető keresztmetszet- és ez-

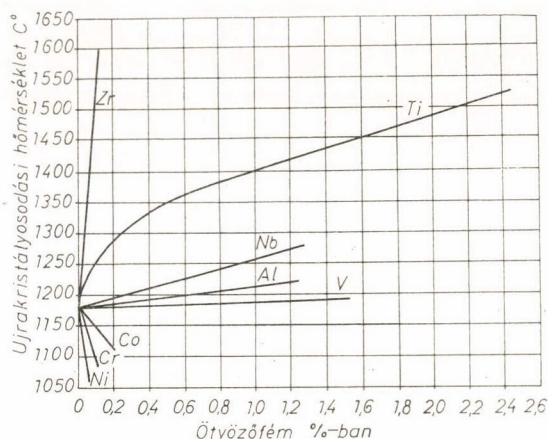
által méret- és költségcsökkentés lehetősége. Ugyanakkor a relatív árak adatai is egyértelműen mutatják a növekvő tisztaság szerepét.



6. ábra. CuE—OM huzalhengerlési tuskó makro-kristályszerkezete

A tiszta molibdén

A nagyolvadáspontú fémek, köztük a molibdén szerepe korunk technikájában szintén rohamosan növekszik. Ennek oka elsősorban igen kedvező fizikai, mechanikai és technológiai tulajdonságaival magyarázható: magas az olvadáspontja (2622°C) és a rugalmassági modulusza (melegen alakítva 36700 kp/mm^2 , újrakristályosítva $32\,200\text{ kp/mm}^2$), a hőmérséklet



7. ábra. A Mo újrakristályosodási hőmérsékletének változása

nagymértékben befolyásolja a képlékeny-rideg állapot átmeneti hőmérsékletét. Technikai tisztaságú Mo esetében ez $-18 + 93^\circ\text{C}$ tartományban változik [15]. Ezzel a jelenséggel magyarázzák a hegesztési varratok szétrepedését is.

A Mo és ötvözetivel foglalkozó nagyszámú irodalom alapján a külföldön folyó kutatások iránya: védőbevonatok és hegesztési módszerek kidolgozása, képlékenységgel növelése, fólia gyártástechnológia fejlesztése, fizikai és mechanikai tulajdonságok anizotrópiájának vizsgálata, magasabb hőmérsékleten újrakristályosodó és alacsonyabb hőmérsékleten ridegedő ötvözetek előállítás.

A 7. ábra mutatja a Mo újrakristályosodási hőmérsékletét néhány ötvöző fém súly %-ának függvényében [16]. Törvényszerűségként jelentkezik a N-nel stabil interstíciós vegyületet képező elemek (Zr, Ti, Nb, Al, V) növelő hatása.

Hazánkban Mo félgyártmányokat fólia, lemez, huzal és rúd alakban elsősorban a vákuumtechnikai ipar használ fel, évről-évre növekvő mennyiségben. Különösen jelentős a fólia (kb. 60 000 m) és a különböző méretű huzalok (kb. 25 tonna) felhasználása. A Mo por ára 28 DM/kg, a félgyártmányoké 550–850 DM/kg, tehát az érték 20–30-szorosára növekszik, ami indokolja az esetleges hazai előállítással kapcsolatos alábbi kutatások elvégzését:

- porkohászati úton és elektronsugaras olvasztással előállított alapanyagok összehasonlító vizsgálata.
- az egyenletes fizikai és mechanikai jellemzőket biztosító hőkezelési paraméterek meghatározása.

gyors változásainak ellenáll, mert kicsi a hőtágulási együtthatója ($5,1 \cdot 10^{-6}$) és jó a hővezetőképessége ($0,32\text{ kal/cm sec }^\circ\text{C}$). A villamosvezetőképessége 1/3-a a rézének. Melegen jól, fokozott tisztaság esetén hidegen is alakítható [14].

A sok kedvező tulajdonsága ellenére azonban a felhasználásánál a legnagyobb problémát a 650°C fölötti hőmérsékleten bekövetkező gyors oxidálódása okozza, amit eddig még ötvözéssel nem sikerült meggátolni. Eredményesnek csak a szilicidbázisú védőbevonatok bizonyultak. Másik hátrányos tulajdonsága, hogy a szennyező tartalom

c) mikroötvözéssel a magas hőmérsékletű izzítás, vagy hegesztés után a képlékenység fokozása.

Műszaki fejlesztési és gazdasági vonatkozású előnyökkel egyaránt indokolható a hazai Mo félgyártmány előállítás mielőbbi megvalósítása [17].

Nagy tisztaságú fémek és ötvözetek, egykristályok

Napjainkban kijelenthető, hogy az „abszolút tisztafém” idealizált fogalom, hasonló a matematikai végtelenhez. A legtisztább fém is olyan fizikai-kémiai rendszer, amely az alapfém kristályos szerkezetéből következően krisztallitokból, mozaikokból, bonyolult felépítésű kristályhatárokból, rácshibákból, szennyezőkből áll, nem beszélve a termodinamikai okokból stabilan jelenlevő vakanciákról. Ezek a szerkezeti összetevők alapvetően meghatározzák a fémek és ötvözeik fizikai, mechanikai, technológiai és alkalmazási tulajdonságait.

A fémek és ötvözetek szerkezetére és tulajdonságaira vonatkozó adatok jelentős része napjainkban bizonytalan, elavultnak tekinthető, mert azokat nem kellő tisztaságú anyagokból határozták meg. Ismert példa a $10^{-4}\%$ nagyságrendben jelenlevő szennyező elemek hatása egyes fémek, vagy ötvözetek képlékenységére, illetve az azt jellemző tulajdonságokra.

Felfedeztek új tulajdonságokat régóta ismertnek hitt fémek egykristályain [18]. Példaként a Fe, Mo és W egykristályoknak a cseppfolyós He hőmérsékleten is tapasztalt képlékenységét, vagy a W és Mo termoemissziós tulajdonságainak anizotrópiáját említem. Ezt a jelenséget már a gyakorlatban is felhasználják.

Az egykristályokból gyártott szerkezeti elemek nem adnak le gázt a vákuumban és nem változtatják méreteiket, illetve alakjukat magasabb hőmérsékleten.

A W egykristályok, továbbá a zónás olvasztással tisztított Mo-ból előállított szalag, fólia és huzal alkalmazása várhatóan egy nagyságrenddel növeli a belőlük előállított vákuumelektronikai szerkezeti elemek élettartamát.

Gyakorlatilag kidolgozták az egykristály előállítási módszert minden fémre és sok ötvözetre (19). A közeljövő feladata az egykristályok tulajdonságainak vizsgálata új ismeretek szerzése és ezek gyakorlati hasznosítása érdekében.

Polimorf fémek

Polimorfnak, mint ismeretes, azokat a fémeket nevezik, amelyeknek a kristályszerkezete szilárd állapotban a termodinamikai jellemzők: a hőmérséklet, vagy a nyomás változás hatására átalakulnak. Az elmélet és a gyakorlat számára fontos kérdés, hogy az egyes módosulatok milyen hőmérséklet, nyomás és összetétel határok közt stabilak. Ismert kvalitatív összefüggés, hogy a nagyobb atomszámú elem a magasabb hőmérsékletű módosulatot stabilizálja, azonban kvantitatív összefüggést ma még nem ismerünk.

A polimorf fémek (pl. Ti, Mn, Fe, Zr) hőállósága jelentős mértékben rosszabb, mint a monomorf fémeké. A Ni alapú ötvözetek 900°C -ig alkalmazhatók, míg a magasabb olvadáspontú polimorf fémek ötvözei csak $500\text{--}700^{\circ}\text{C}$ -ig.

Pl. a szupravezető Ti, Zr, Hf, Th, U, Tl, Sn, La, Hg polimorf fémek magasabb hőmérsékletű módosulatainál magasabb a szupravezetés kritikus hőmérséklete [20].

Fontos tulajdonság, hogy az egyes módosulatokban változik az adott ötvözőfém oldhatósága.

Az erős mágnesterek és a nagy energiájú elemi részecske besugárzás hatása az allotrop átalakulásokra majdnem teljesen ismeretlen. Gyakorlatilag jelenleg csak az Fe polimorfizmusát használjuk ki. Várható, hogy a jövőben mélyrehatóan vizsgálni fogják a többi fém, elsősorban a Mn, Co, Ti, Sn, Zr allotrop átalakulását is. Ugyanis az egyes módosulatoknak eltérők a fizikai tulajdonságai (vill. vezetőképesség, hőtágulás, mágneses jellemzők, termoemisszió, szupravezetés stb.), ami nagy lehetőségeket biztosít a meghatározott fizikai tulajdonságú szerkezeti anyagok kidolgozására.

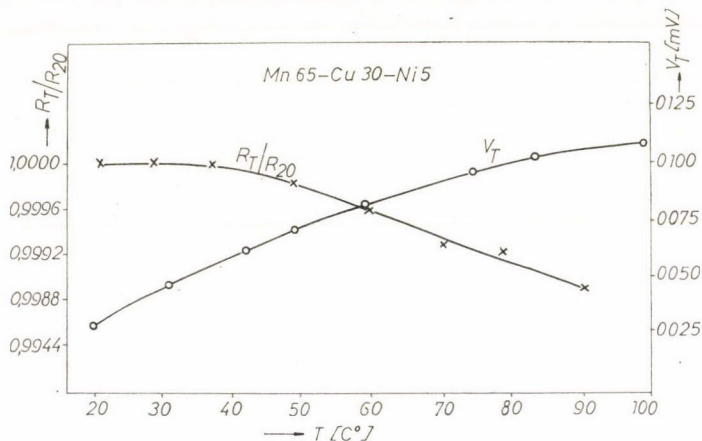
Példaként az Mn alapú nagy fajlagos villamos ellenállású, kis hőfoktényezőjű szabályozó ellenállás ötvözetek hazai kutatási eredményeit ismertetem [21]. A miniatürizálási törekvések indokolják olyan anyagok kidolgozását, amelynek Ohm/kg értéke többszörösen felülmúlja az általánosan használt anyagokét, de ugyanakkor a többi tulajdonságai (hőfoktényező, termofeszültség rézzel szemben) azonos szintűek. Az új Mn65—Cu30—Ni5 és Mn65—Cu27—Ni5—Cr3 ötvözetek kutatásának eredményeként sikerült az eddig ismert és elterjedten használt konstantán-nál (Cu55—Ni44—Mn1) közel 4-szer nagyobb fajlagos villamos ellenállású ötvözetet előállítani, melynek jellemzői:

fajlagos villamosellenállás $2 \text{ Ohm/mm}^2/\text{m}$

ellenállás hőfoktényezője $2 \cdot 10^{-5}/^\circ\text{C}$

a rézzel szembeni termofeszültség $1 \cdot 10^{-5} \text{ V}/^\circ\text{C}$

A 8. ábrán látható az RH 200 jelű supermanganin ötvözet ellenállás hőfoktényezőjének és a rézhez viszonyított termofeszültségének a változása a hőmérséklet függvényében.



8. ábra. RM 200 „supermanganin” ellenállás hőfoktényezőjének és a Cu-hoz viszonyított termofeszültségének a változása

A Cr ötvözés, mint azt a vizsgálatok igazolják, stabilizálja a γ fázist. A kutatást célszerű a $\gamma \rightarrow \alpha$ átalakulás kinetikájára vonatkozóan tovább folytatni. Az elért eredmények jelentősége, hogy további lehetőségeket biztosít új Mn alapú ötvözetek kidolgozásához.

Fémvegyületek

A fémes szerkezeti anyagokat felhasználó iparágak gyorsütemű fejlődése újabb és újabb különleges fizikai és mechanikai tulajdonságú anyagok kidolgozását igényli. A jövő számára e téren a legjelentősebb tartalékként vehetők figyelembe a polimorf fémek mellett a fémvegyületek, amelyeknél a lehetséges kötéstípusok nagyszáma ($A_3B \sim 3000$, $A_2B \sim 2000$, $AB \sim 3000$) és a sokféle kristályszerkezetük a különleges fizikai (szupra- és félvezető, emissziós-, mágneses-, optikai) és mechanikai tulajdonságok (pl. a nagyjelentőségű szuperképlékenység, hőállóság) széles spektrumát ígéri és ezért még kevésbé ismert új anyagként jelentkeznek. Példaként megemlítem a több mint 1000 szupravezető közül az Nb_3Sn , V_3Ga (VZr) $_3Ga$ vegyületeket, az $MoSi_2$ 1700 °C-os hőállóságát, a ritkaföldfém-hexaboridok jó termoemissziós tulajdonságait, a σ fázisok hangvezetőképességét és a Cu-Zn ötvözetrendszer β fázisának szuperképlékeny állapotát.

A fémvegyületek közismert és sajátos mechanikai tulajdonsága, hogy nagy a keménységük és ridegek. A ridegséget főleg a diszlokációk keresztirányú mozgásának az akadályai, vagy az intersztíciós atomok kristályhatármenti adszorpciója és kiválása okozza [22]. Az újabb kutatások bebizonyították, hogy minden fémvegyület a 0,7–0,9. T_{op} hőmérsékleten rendkívül képlékeny és szilárdságuk 0,5–0,8. T_{op} hőmérsékletig növekszik. Ugyanakkor a tiszta fémek és szilárdoldat típusú ötvözetek szilárdsága a hőmérséklet emelkedésével általában csökken.

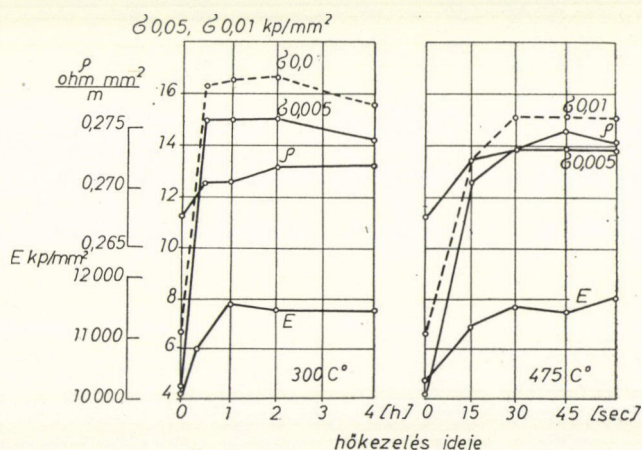
Ezért a jövő nagy lehetősége és fontos feladata olyan új anyagok kidolgozása és felhasználása, amelyek a vegyület fázisok különleges fizikai tulajdonságait az alapfém, vagy szilárdoldat nagy képlékenységét egyidejűleg biztosítják.

Rézalapú rugóötvözetek

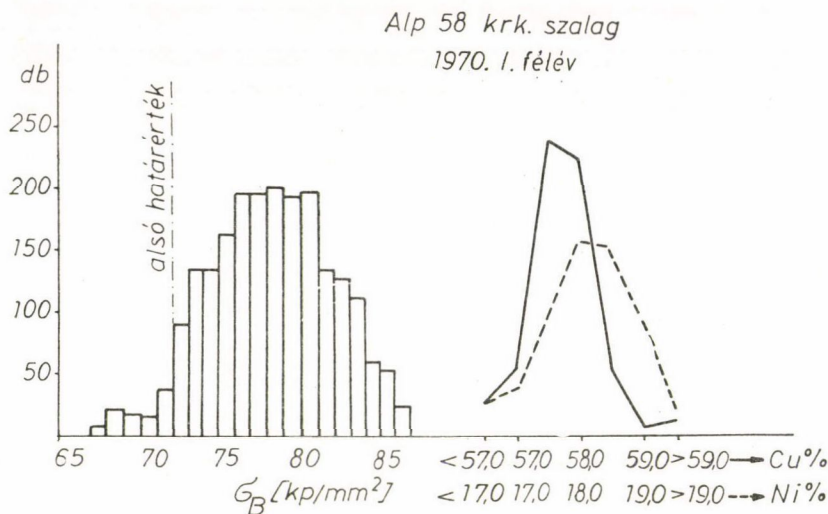
A híradástechnikai iparunk évente többszáz tonna Alp 58 jelű (Cu58—Ni18—Zn24) szilárd oldat típusú rugóötvözetet használ fel a távbeszélő központok jel-fogóinak a gyártásához. A távbeszélő hálózat átállítása a jelenlegi elektromechanikus rendszerről elektronikus megoldásúra gazdaságossági okok miatt csak 1985 után várható [23].

A felhasználó ipar fejlődésével összhangban, figyelembe véve a gazdaságos export lehetőségeket is 1975-re a gyártás 300%-os növekedését irányozták elő. Ezek az adatok jellemzik az Alp 58 ötvözet fontosságát.

9. ábra. Az Alp 65 ötvözet jellemzőinek a változása a 300 és 475 °C-on végzett hőkezelés hatására



A rugóanyagok alapvető tulajdonsága az igen kis mértékű képlékeny alakváltozásokkal szembeni ellenállás, amelyet a rugalmassági határ jellemez. *Rjabisev A. M.* és szerzőtársai közleménye alapján [24] a 9. ábrán bemutatott Alp 65 jellemzőinek a változását az idő függvényében 300 és 475 °C-on végzett hőkezelés hatására. Az ábrából látható, hogy a jellemzők mindkét esetben hasonló jelleggel változnak meg. A szerzők a folyáshatár, és E növekedését poliganizációval és Cu_2NiZn típusú rendezett domének (esetleg K állapot) képződésével magyarázzák.



10. ábra. A Csepeli Fémműben 1970. I. félévben gyártott Alp 58 krk szalagok összetételének és a σ_B értékeknek a gyakorisága

A 10. ábra a Csepeli Fémműben 1970. I. félévében gyártott Alp 58 rugószalagok összetételének és a kapott B értékeknek a gyakoriságát mutatja. A szakítószilárdság és az összetétel között korrelációt nem sikerült megállapítani.

Az utóbbi 10 év irodalmában meglepően kevés szerző foglalkozik a CuNiZn rugóötvözetek fémfizikai problémáival. Az ötvözet tulajdonságainak javítására a Zn egy részét Mn-nal és Si-mal történő helyettesítését javasolják. *Köster* és munkatársainak több tanulmánya foglalkozik a rendeződés kérdéseivel [25].

A fentiek alapján megállapítható, hogy az alpakkánál ma még nem ismertek kielégítően az ötvözet rugalmas tulajdonságai, valamint összetétel és a strukturális állapota közötti összefüggések.

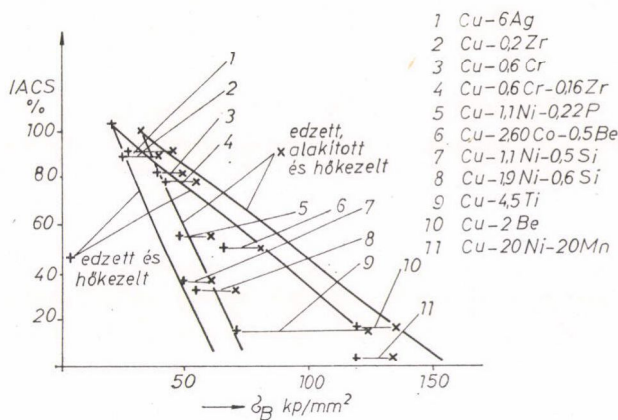
A rézalapú rugóötvözetek egy külön csoportját alkotják a nemesíthető Cu ötvözetek. Ezeket elsősorban kapcsoló elemek, illetve kontaktus rugókhöz, továbbá pont- és vonalhegesztő elektródák gyártásához használják, ahol fontos követelmény a jó villamos vezetőképesség.

A 11. ábrán a gyakorlatban legelterjedtebben használt ötvözetek vezetőképességének és a B értékének az összehasonlítása látható (3). Az ábra szembevetően mutatja a termomechanikus kezelés (edzés-, hidegalakítás-, nemesítő hőkezelés) szilárdság növelő hatását, másrészt az a kvalitatív következtetés is lezűrhető róla, hogy

minden 10 kp/mm^2 szakító-szilárdság növekedése kb. 8—22% vezetőképesség csökkenéssel jár.

A nemesíthető ötvözetek fejlesztési iránya jelenleg az optimális σ_B viszonyt biztosító gyártási paraméterek meghatározása és ennek ipari hasznosítása továbbá új, kedvezőbb ötvözet típusok kidolgozása. E téren nagy ígéret az oxigén, mint ötvöző elem, mely az ún. belsőleg oxidált ötvözetek gyártásánál nyújt kedvező eredményeket. Véleményem szerint az egyik legnagyobb perspektívával rendelkező ötvözetrendszer a Cu-Cu₂O-Cd ötvözetrendszer, mert nem tartalmaz drága ötvöző elemeket, mint pl. Be, Zr, Ag és igen kedvező fizikai és mechanikai tulajdonságokat ígér. Sikertült ezzel az ötvözzel 95%-os vezetőképességet és σ_B 120—140 kp/mm^2 szakító szilárdságot is elérni.

Az ötvözetrendszerrel kapcsolatban megjegyzem, jelenleg még ismeretlen, hogy a Cd milyen körülmények hatására nem képez CdO vegyületet az oxigén tartalmú Cu-ban.



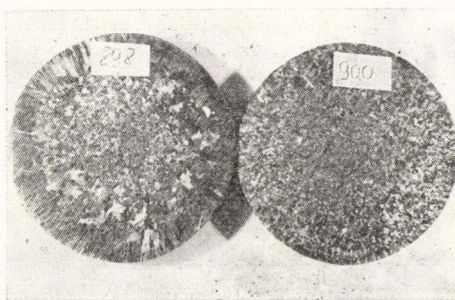
11. ábra. Nemesíthető rézötvözetek villamos vezetőképessége (100% = 58 m/Ohm mm²) és σ_B értékei

Mikroötvözés

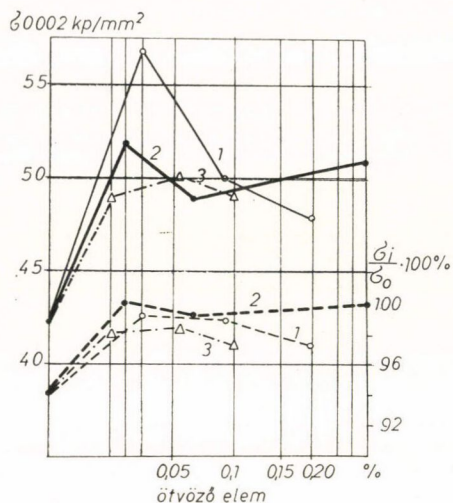
A gyakorlatban már régóta ismert és viszonylag elterjedten alkalmazott módszer az ún. szemcsefinomítás, vagy modifikálás. Bizonyos elemeket — esetleg egyszerre többfélét is — az olvadékba kismennyiségben adagolva a kristályosodásnál finomabb szemcséket kapunk, vagy a mikroötvözés meggátolja az oszlopos kristályok képződését. Melegalakításnál a kiskoncentrációban jelenlevő adalékok javítják a képlékenységet. Példaként a 12. ábrán bemutatom a Monel ötvözetbe adagolt 0,015—0,03% B hatását az öntött anyag makrokristály szerkezetére.

További gyakorlati példa a szemcsefinomításra: CuZn ötvözetekhez 0,02% V+B, 0,05% Ti+B, Cu-Ni-Zn ötvözetekhez 0,05—0,5% Zr, a káros Pb szennyezés hatástalanítására Ce, Zr és U adagolását találták hatékonynak.

Stöchiometriailag nem látszik megfelelő összefüggés a szennyező tartalom és a hatásos adalék, vagy mikroötvöző elem mennyisége között (26). A szemcsefinomítás és a képlékenység növekedés jelentőségét a metallurgiai tényezők mellett felü-



12. ábra. 0,015% és 0,03% B ötvözés hatása a Monelfém makrokristály-szerkezetére



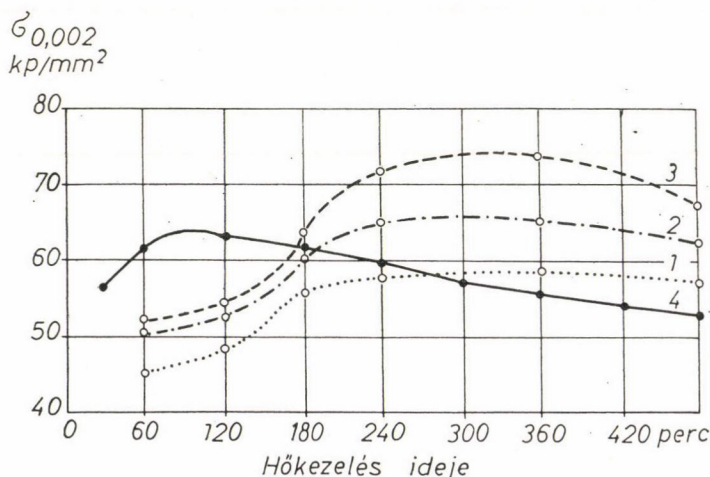
13. ábra. Cu-Al 5 ötvözet rugalmassági határának a változása mikroötvöztetés hatására

Ismert és jelentős hazai eredmény a Ga mikroötvöztetés alkalmazása a W huzalgyártásban és a kockatextúrás transzformátorszalag előállításánál.

A mikroötvöztetésre vonatkozó gyakorlati eredmények és az irodalmi adatok összevetése alapján megállapítható, hogy jelenleg csak egyedi esetekre vonatkozó kvalitatív

leti effektusokkal a kristályhatár energia kedvező megváltozásával és a kristálycsíra képződésére gyakorolt hatással magyarázzák (27).

A 13. ábra a szilárdoldat típusú Cu-Al 5 és 14. ábra a nemesíthető Cu-Be 2 ötvözetek rugalmassági határának a változását mutatja, a mikroötvöztető elemek mennyiségének, illetve a hőmérsékletnek a függvényében (13. ábrán mikroötvöztető elemek: 1—P, 2—Be, 3—B, 14. ábra: 1 mikroötvöztető nélkül, 2—0,05% Mg, 3—0,1% Mg, 4—0,05% P). Az ötvözetek jellemzőinek az ábrákon bemutatott változását a szilárd oldat típusú ötvözeteknél a diszlokációk mozgásának az akadályozásával a nemesíthető ötvözeteknél pedig a kristályhatárok környezetében stabil atom szegregátumok keletkezésével magyarázzák (28, 29), amelyek hatással vannak a precipitációs folyamatok mechanizmusára és kinetikájára.



14. ábra. Cu-Be 2 ötvözet rugalmassági határának a 320 °C-on végzett hőkezelések utáni változása. Különböző tisztaságú Al, Cu és a Na relatív keresztmetszetének és árának alakulása különböző hőmérsékleteken

elméleti magyarázatok állnak rendelkezésre. A gyakorlatban már bebizonyított eredmények és a módszerben rejlő lehetőségek indokolják a mikroötvözés kutatását és a használatos módszerek további elméleti megalapozását.

Összefoglalás

Tanulmányomban megkíséreltem ismertetni olyan fémfizikai vonatkozású feladatokat, amelyek részleges megoldása is gyorsan hasznosítható. A hazai fémfizikai kutatások várható eredményei:

- a) Egyes területeken, mint például az oxigénmentes tiszta réz, rézalapú rugó-ötvözetek, nemesíthető-, korrózióálló rézötvözetek gyártása és felhasználása, a világszínvonal elérését lehetővé teszi.
- b) A felhasználó ipar késztermékei élettartamának és megbízhatóságának a növelése. Új gyártmányoknál a miniatürizálás elősegítése.
- c) Eddig nem használt, vagy nem ismert fémes szerkezeti anyagok kidolgozása és ipari alkalmazásba vétele, mint pl. a krioelektrotechnikai anyagok a szuper- és szupravezetők, fém Na villamosvezető anyagként, szuperképlékeny ötvözetek, Mn alapú ötvözetek és a Mo félgyártmány előállítás technológiája.
- d) A gyártó és felhasználó ipar és általában a fémek fizikájával foglalkozó hazai tudomány gyorsabb ütemű fejlődése.

IRODALOM

1. Hoffman, W. E., Metall, 23, 1192, 1969.
2. Freeman, M. I., Metall, 24, 104, 1970.
3. Balázs F.: A színesfém gyártmányok fejlődési irányai és fejlesztésük helyzete a Csepeli Fémműben. Kézirat 1970.
4. Alexander, W. O., Futures, 12, 500, 1969.
5. Nusbaum, A., L'Électricité Electronique Moderne 28/29, 11, 1969.
6. Richards, T. L., Stamford, M. S. The Wire Industry, 9, 937, 1967.
7. Franqué, O., Draht Welt, 54, 725, 1968.
8. Hatta G.: Rugómeignyulás mérés, 5/2 d Csepeli Fémmű téma zárójelentése, 1970.
9. Doyama, M., Cotteril R. M. Metals and Alloys, International Conf. Tokyo 1967.
10. Scheucher, E., Z. f. Metallkunde, 5, 60, 422, 1969.
11. Butomo, D. G., Cvetnue Metallü, 2, 87, 1968.
12. Sellers, C. M., Scheffield Univ. Met. Soc. 8, 43, 1969.
13. MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Jelentés KM — 2, 19/1967, 1969.
14. Vol, A. E.: Sztrojenyje i szvojsztva met. szisztem. Izd. Fiz. Mat. Moskva. 1959.
15. Express Inf., 16, ref. 51. 1965.
16. Wiedeman, K. H., Metall, 24, 748, 1970.
17. Ritka — és szorványfém szükségletek kielégítésének módoszatai, OMFB, 3—703—T, 1970.
18. Szavickij, E. M., Izvesztija AN SzSzSzR, Metallü, 5, 3, 1965.
19. Szavickij, E. M., Burhanov, G. Sz.: Metallovegyenie tugopl. metallov i szplavov, Nauka, 1967.
20. Szavickij, E. M.—Baron V. V.: Metallovegyenie szverzkprovadjácsih materialov, Nauka, 1969.
21. Dr. Albert B., Eigner V., Finomkohászati Ankét, előadás 1966.
22. Stolotoff, N. S., Davies R. G., Progress in Mat. Sci. 13. 1968.
23. A híradástechnika fejlődése 1985-ig. OMK 71/TP 7/1970.
24. Rjabisev, A. M., és szerzőtársai, Metallovegyenie i term. obr. met. 8, 61, 1970.
25. Tonkaja sztruktura i szvojsztva tverdüh rasztvorov. Szb. Metallurgia, 60, 99, 1968.
26. Jackson, R. I., Edge, D. A., Moore, D. C., The Journal of the Inst. of Metals. 98, 193, 1970.
27. Dr. Stefán M., Különleges rézötvözetek, Ankét 1965.
28. Rahstadt, A. G., Metallovegyenie i term. obr. metallov, 10, 57, 1967.
29. Thagapszojev, H. G., Rahstadt, A. G., Metallovegyenie i term. obr. metallov, 2, 19, 1970.

AZ ÁRAMKÖR-INTEGRÁLÁS ELVEINEK ÉS MÓDSZEREINEK FEJLŐDÉSI IRÁNYAI

SZÉP IVÁN

Híradástechnikai Ipari Kutató Intézet, Budapest

A társadalmi lét kapcsolatai és kölcsönhatásai nagyszámú információ létrehozását, tárolását, továbbítását igénylik, amelyben nélkülözhetetlen szerepet töltenek be a korszerű elektronikai rendszerek. Az információk számának növekedése mellett azok minél gyorsabb továbbítása is fontos és ez egyre nagyobb, egyre bonyolultabb elektronikai áramkörü rendszerek tervezéséhez, építéséhez vezet.

Bármennyire is újszerűen hatnak pl. a modern számítógépek, áramköreik megtervezésénél lényegében a klasszikus elektrodinamikát használjuk. Az áramkörü egyenletek R , L , C állandói és a feszültség vagy az áram változását leíró függvények, meghatározott alkatrészek — ellenállások, kondenzátorok, tekercsek, elektroncsövek, félvezető eszközök — segítségével teljesülnek.

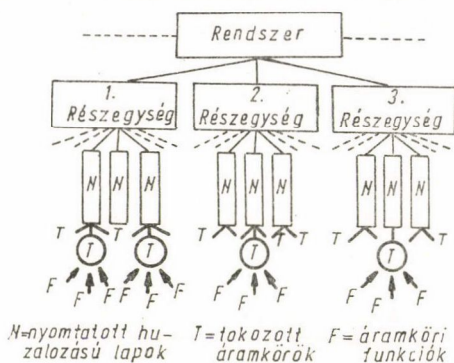
Az egyre bonyolultabb feladatok ellátására alkalmas elektronikai rendszerek iránti igény együtt járt az alkatrészek számának és ezzel a rendszerek méretének, tápenergiaigényének jelentős megnövekedésével. Az alkatrészek számának növekedésével viszont nőtt a meghibásodások veszélye, elsősorban az összekötési helyeken, de a méretek és az energiaigény növekedése is új utakra készítette a konstruktőröket. Megkezdődött a miniatürizálás és kifejlesztésre kerültek az integrált áramkörök. Az áramkörintegrálás segítségével nagymértékben sikerült növelni a térfogategységre eső alkatrészsűrűséget, a megbízhatóság egyidejű fokozása mellett. Létrejött a mikroelektronika és ezt elsősorban az integrált áramkörök tették lehetővé.

A ma használatos integrált áramkörök alkatrész sűrűsége szilárd hordozóra számítva egyes esetekben a $10^5/\text{cm}^3$ -t is meghaladja, a szükséges védőburkolat miatt azonban a tényleges sűrűség $10^3/\text{cm}^3$ alatt marad. Ez mindjárt egy olyan ellentmondás, ami ösztönzi a fejlődést. Tömör, vékony szigetelő bevonatok alkalmazása a jelenlegi tok-konstrukciók helyett fontos megoldandó feladata a jövő technológiájának. Ez szükségképpen maga után vonja a kivezetőknek a jelenlegitől eltérő kialakítását és ezzel együtt a szerelési módszerek megváltozását. Sejthető ebből a kiragadott példából, hogy az integrált áramkörök technológiája igen összetett kölcsönhatásban áll magukkal a mikroelektronikai rendszerekkel. Mindamellett hangsúlyozni kell, hogy a mai integrált áramkörök annak ellenére, hogy esetleg monolit kivitelben készülnek, elvileg ugyanolyan áramkörü megfontolásokon alapulnak, mint különálló alkatrészekből készült nem-integrált elődeik. Az integrálás előnye viszont, hogy meghatározott áramkörü funkciót alakít ki a szilárd test tömbjében, technológiailag biztosítja a funkciót hordozó elemi alkatrészek szilárd belső összeköttetését, ezáltal jelentősen lecsökken a külső összekötések száma. Gyakorlatilag persze eltekinthetünk a belső elemektől és magát az áramkört tekinthetjük funkcionális egységnek. Eddigi tapasztalataink szerint azonban ez jelenleg még nem célszerű, mivel egyrészt a tervezési módszerek, másrészt a technológia fejlődése egyre összetettebb

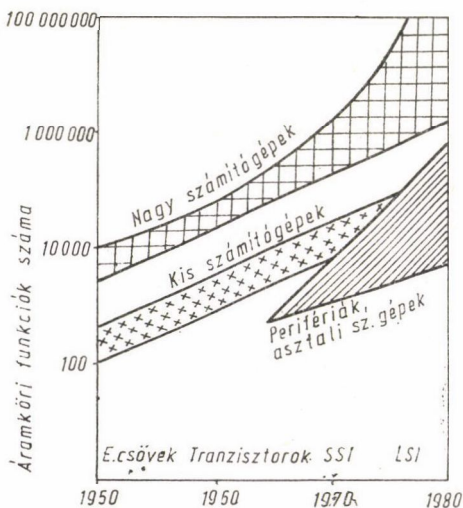
funkciók megvalósítását teszi lehetővé, így az egység fogalma is gyorsan változna. Az integráció foka éppen napjainkban mutat olyan növekedést a kis (SSI) és közepes (MSI) fokú integrálás után a nagyfokú integrálás (LSI) irányába, ami arra utal, hogy jelenlegi tervezési és technológiai lehetőségeink még nem érték el teljesítőképességük határát. Tekintsük át röviden ezeket a lehetőségeket.

Áramkörtervezés

Bonyolult elektronikai rendszerek tervezése ma számítógépek segítségével történik. A rendszert feladatából kiindulva először részegységekre osztják úgy, hogy számuk minimális, tartalmi komplexitásuk viszont minél nagyobb legyen (1. ábra).



1. ábra. Elektronikai rendszer felosztása



2. ábra. Elektronikus számítógépek funkció számának prognóza

Ugyanílyan elvek szerint történik a részegységek felosztása pl. áramköri kártyákra (N), amelyeken többek közt az integrált áramkörök (T) foglalnak helyet. Az áramkörök választéka ismét úgy tervezendő, hogy a bennük integrált funkció (F) száma minél nagyobb, maga a választék viszont minél korlátozottabb legyen. Az áramköri választékot a logikai képletek alapján számítógépes szimulációval ellenőrzik; ezt követi az áramkörtervezés, ami lényegében az elemi alkatrészek számának (ellenállások, tranzisztorok), elrendezési rajzának kialakítása az optimalizálás elvei szerint. Az elrendezési rajzok készítésének korszerű módszerei ugyancsak számítógépes vezérlésen alapszanak. Ezekről fototechnikai kicsinyítő és ismétlő eljárásokkal készülnek az áramkörgyártásban használt maszkok.

A tervezés egyszerűsíthető, ha ismert tulajdonságú elemi alkatrész készletből állítható elő az áramkör. Az áramkör lehetséges sűrűségét a kicsinyítés hibáin és a használt fotolemez felbontóképességén kívül elsősorban a technológia fotokémiai módszerei (a fényérzékeny lakkréteg tulajdonságai, az illesztési pontosság) szabják meg. Ezeket figyelembe véve átlagosan $10^5/\text{cm}^2$ alkatrész-sűrűség megvalósíthatónak látszik, főleg a technológiai hibaforrások kiküszöbölésével.

Ilyen nagysűrűségű integrált áramkörök előállítása valóban szükségesnek tűnik, ha pl. a számítógépek fejlődési irányzatát vizsgáljuk (2. ábra). 1980 körül már olyan

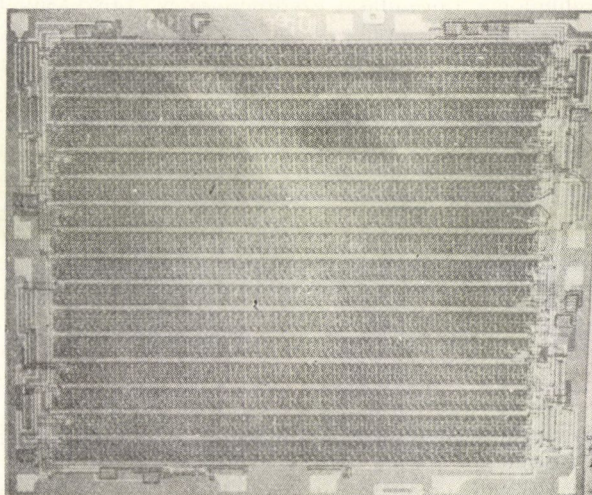
gépek várhatók, amelyekben 10^8 -nál több áramkörü funkció beépítése szükséges. A mai integráció fokkal számítva ez kb. 1 millió integrált áramkör tokot jelentene. A gazdaságos kihozattal nézve szilíciumalapú áramkörökből egyelőre $4 \times 4 \text{ mm}^2$ méretű egység a felső határ, amelyen pl. 250—300 kapu-funkció helyezhető el. A fenti esetben ez még mindig 300—400 ezer tokot fog jelenteni.

Az áramkör-tervezés soron következő feladatai a funkció készlet optimalizálásán túl olyan funkcionális összefüggések keresése, amelyek a klasszikus áramkörelmélet elemi szemléletét mellőzve magasabbrendű áramkörszintézist tesznek lehetővé. Ilyen fejlődés lehetőségére mutat pl. a logikai áramkörök gyakorlatában kialakuló számláló, összeadó, léptető, tároló és más komplex funkciók rendszere. Az is vizsgálendő, hogy az analóg áramkörök mennyiben szintetizálhatók vagy bonthatók a funkcionális elv szerint.

A racionális funkciókészlet kialakítása előfeltétele az ún. funkcionális eszközök létrehozásának. A mikroelektronika következő korszakában ezekre nagy szükség lesz, és aligha képzelhető el létrejöttük a klasszikus R, C, L alkatrész-szemlélet alapján. A funkcionális eszközökben már semmilyen alakban sem találjuk az alkatrész-elemeket, viselkedésük az anyagi rendszer belső sajátságain fog alapulni.

Technológiai módszerek

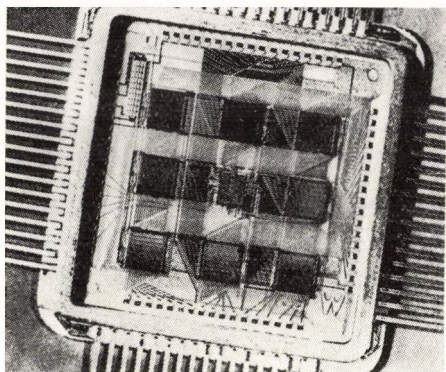
Az áramkör-integrálás legkorszerűbb módszere a félvezető alapú monolit-technika, amely a szilíciumban szelektív módon kialakított p - és n -típusú tartományok felhasználásával ellenállásokat, tranzistorokat, diódákat, ritkábban kapacitásokat integrál össze és ilyen módon állítja elő a kívánt funkciókat, illetve áramkört. A jelzett szelektivitást a szilícium felületén kialakított oxidréteg p -, illetve n -típusú diffúziók behatolását gátló hatása alapján, illetve az oxidnak fényérzékeny réteg segítségével történő eltávolításával éri el. E módszer igen gondos kivitelezésével pl. MOS-rendszerekben $3 \times 4 \text{ mm}^2$ alapterületen 5000—6000 tranzistor is integrálható (3. ábra). Ez a sűrítés akkor lehetséges, ha a viszonylag sok helyet foglaló összekötő fémezést két rétegben vesszük fel a felületre. A két réteget természetesen szigetelőréteg választja el.



3. ábra. 1024-bites dinamikus MOS-shift register

A jelenleg használatos maszkolási eljárások felbontóképessége kb. $1 \mu\text{m}$ széles csíkok maratását teszi lehetővé; két ilyen csík távolsága egymástól azonban $5 \mu\text{m}$ -

nál nem lehet kevesebb. A kristály méretek növelésének és így az áramkörüi funkciók sűrítésének a szilícium eredő hibasűrűsége szab határt, amely a kihozatalt határozza meg. Így célszerűnek látszik kisebb alapterületű elemi áramköröket a szilícium szelet megbontása nélkül egyedi összekötő fémmezéssel ellátni. Ennek módját az elemi áramkörök bemérése után számítógéppel határozzák meg, amely a szükséges



4. ábra. Hibrid integrált áramkör

fémzési maszk ábráját is programozza. Számítással igazolható, hogy ha a kristályhibák számát cm^2 -ként kettőre sikerülne lecsökkenteni, akkor 30% kihozattal számolva, közel egy nagyságrenddel növelni lehetne az elemsűrűséget a jelenlegi technológiai módszerek alkalmazása mellett.

A nagyfokú integrálás monolit megoldásán kívül figyelmet érdemelnek az ún. hibrid megoldások is, amelyek több, kisebb komplexitású monolit elemet szigetelő hordozón integrálnak össze (4. ábra). A monolit elemek kivezetőinek megfelelő megoldásával (tartóvezetékek vagy fém-csepp kontaktus alkalmazása) így is jelentős sűrítés érhető el. Az ábrán látható módszerrel 6 kerámiatartó felhasználásával

$3,5 \times 4,5 \text{ cm}^3$ térfogatú 8192 bites operatív memóriát készítettek, amely a dekódoló áramköröket is tartalmazta.

Az áramkörök elemsűrűségének növelésére irányuló törekvések kétségkívül a technológia finomítását eredményezték. Így kerültek alkalmazásra az elektron- és ionsugaras módszerek. Az argon-ionokkal bombázott szilícium-dioxid oldhatósága jelentősen megnő és így szelektív marást végezhetünk fotoreziszt-réteg alkalmazása nélkül. A fémzés kialakítása vezérelt fókuszált elektron sugárral ugyancsak kiküszöböli a rezisztműveletet. Az adalékelemek ion-implantációval történő bejuttatása a diffúzió előnytelen jelenségeit kiküszöböli ki, bár nem valószínű, hogy a diffúziót minden esetben pótolni tudja. E módszerek előnye, hogy egy nagyságrenddel kisebb méretek valósíthatók meg velük és így az igen nagy sűrűségű integrálás egyelőre egyetlen lehetőségét jelentik. Bár jelenleg még költségesek, ez nem képezhet elvi akadályt alkalmazásuk előtt.

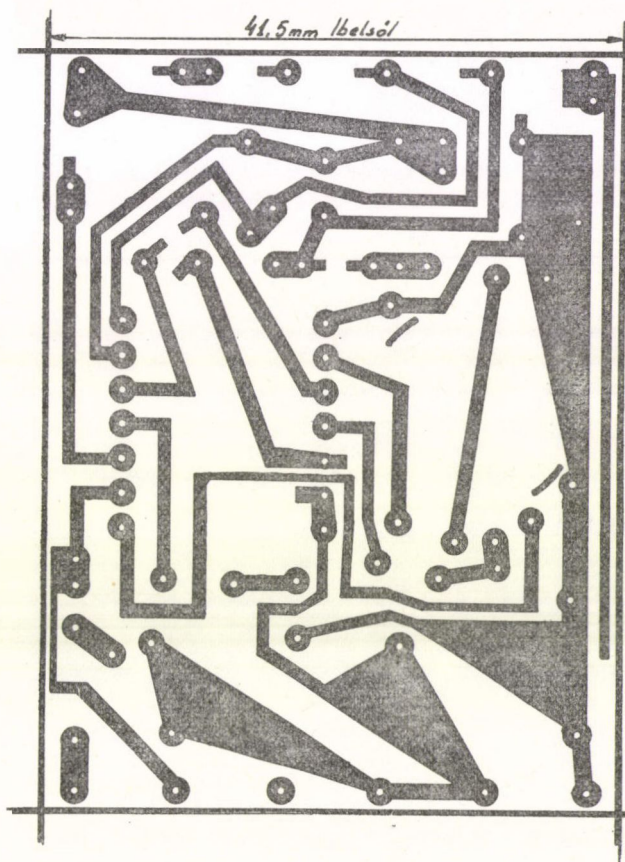
A technológia jelentősebb új irányzatai között várható a holografikus maszkok használata, amely még a fényoptikai elven alapuló módszerek finomítását jelenti. Mivel ez az eljárás az áramkör rajzoknak monokromatikus fénnel a szilícium-felületre történő vetítését alkalmazza, a szokásos kontakt eljáráshoz képest pontosabb és hibamentesebb leképezést tesz lehetővé.

A monolit integrált áramkörök választékában jelenleg a bipoláris vezetési mechanizmuson alapuló áramkörök képezik a fő súlyt. A memória áramkörök családjában a fém-szigetelő-félvezető (MIS) struktúrájú rendszerek nagy figyelmet keltettek, különösen mivel ez a struktúra egyszerűbb áramkörüi szintézist és nagyobb elemsűrűséget tesz lehetővé. A működés gyorsaságát tekintve a bipoláris eszközökben a kisebbégi hordozók relaxációs effektusai, a MIS-struktúrákban a nagy kapacitív elemek jelentenek korlátozást.

E korlátok megszüntetésére számos új kiegészítő elemet vizsgáltak meg. A fém-

félvezető rendszer kontaktus-tulajdonságain alapuló Schottky-diódák a bipoláris szerkezetekbe beépítve a kisebbségi hordozók felhalmozódását előzik meg, mivel áramvezetésükben csak többségi hordozók vesznek részt. A MIS-rendszerek parazita kapacitását a vezérlő fém-elektrod alatt kialakított vékony szilíciumréteg alkalmazásával sikerült jelentősen csökkenteni, ez a réteg ugyanakkor a többi elektrod viszonylagos helyzetét is pontosan meghatározza.

Új irányzatként bontakozik ki a szigetelő hordozón kialakított félvezető rétegeket alkalmazó integrált áramkörök technológiája. A cél a monolit áramkörökben elkerülhetetlen $p-n$ átmenetek kapacitív jellegéből adódó korlátozó hatások

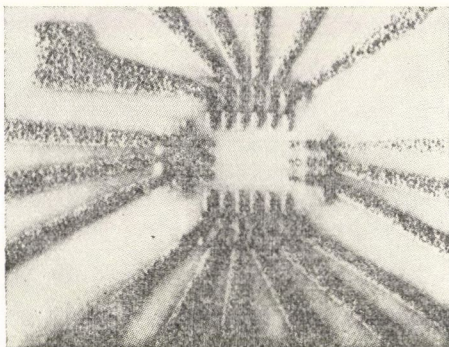


5. ábra. Kétoldalt fémezett kerámia szerelőlap

kiküszöbölése és ezáltal az áramkörök működési gyorsaságának növelése. Itt a szigetelő hordozó a tulajdonképpeni összekötő, integráló rész, az elemi alkatrészek egymástól elkülönített félvezető tartományokban vannak kialakítva, $p-n$ átmenetes vagy MIS-szerkezettel. Ez a technológia költségesebb mint a monolit félvezetőké, ezért alkalmazása csak akkor lehet indokolt, ha lényeges előnyöket tud felmutatni.

Ilyenek máris jelentkeznek pl. a mikrohullámú rendszerek területén. A szigetelő alapú technológia lehetővé teszi ugyanakkor más, pl. összetett félvezető anyagok használatát is, és ezzel *effektusok*, pl. optikai és elektromos hatások „integrálására”, ún. optoelektronikai áramkörök kialakítására is mód nyílik. Ennek a fejlődésnek a legelején tartunk, jelentősebb eredmények eléréséhez az összetett félvezető rendszerek, ezek átmeneteinek („heteroátmenetek”) alaposabb elméleti és gyakorlati ismeretére van szükség.

Az integrált áramkörök technológiájának fejlődése azonban nemcsak a félvezetők technológiájával függ össze, hanem a tokozás technológiájával is. A jelenleg



6. ábra. Tartóvezetékes kerámia szerelőlap

leg használt hengeres vagy hasáb alakú 10—14 kivezetésű tokok nyilván nem felelnek meg a nagy integráció fokú áramkörök céljaira. Ugyanakkor a kivezetők számának növelése még aránytalanabbá teszi a hasznosított térfogatot. Új utak keresése célszerű itt is: a körülményes huzalos kivezetések helyett tartóvezetékek (beamlead) vagy forrasztható kontaktusgömbök alkalmazása előnyös lehet. A kristályelemek sűrítése lehetséges úgy is, ha kétoldalt nyomtatott huzalozással ellátott kerámia lapokra szereljük őket. Ez a huzalozás szitanyomással előnyösen előállítható (5. ábra). Ugyanakkor több ilyen kerámia lap is összefogható, ami igen jó

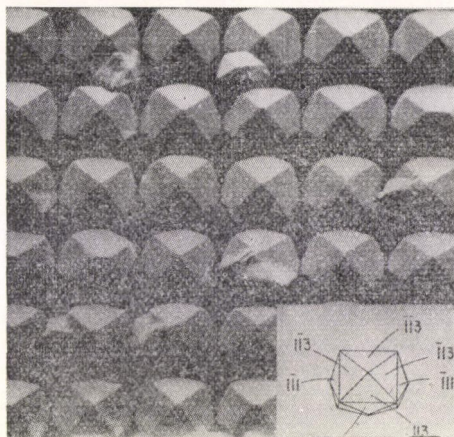
terkitöltésű tokot eredményez. Galvanizált huzalozással kerámia lapon tartóvezetékek is előállíthatók, ami egyszerűbbé teszi a kristályelemek beszerelését (6. ábra). Az LSI áramkörök szerelésteknikájában az ilyen többretegű kerámiahordozók alkalmazása látszik a legcélszerűbbnek. A félvezető elemek légmentes bevonására kísérletek folynak különböző védőrétegekkel (üveg, alumíniumoxid, szilíciumnitrid stb.), amelyek a terjedelmes tokok mellőzését tennék lehetővé. Várható, hogy ezek a munkák eredménnyel fognak végződni.

Funkcionális eszközök

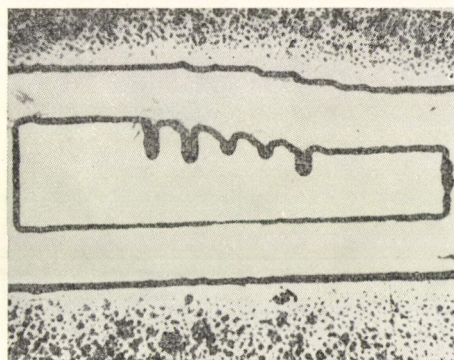
Mint már említettük, a klasszikus áramkörelmélet elvei szerint integrált áramkörök elemsűrűsége $10^5/\text{cm}^2$ határhoz tart, amit az anyagok és az előállításukhoz szükséges eszközök tulajdonságai szabnak meg. Így pl. az elektromos jellemzőket biztosító adalékanyagok koncentrációja annál nagyobb ingadozást mutat, minél kisebb térrészben kívánjuk azt létrehozni. Ez lehetetlenné teszi a kívánt elektromos paraméterek beállítását. A fototechnikai műveletek felbontóképességét a fény diffrakciója korlátozza; szóródási effektusok az elektronsugaras módszereknél is fellépnek. Mindez meghatározza a legkisebb lehetséges méretet. Ilyen okok miatt mai áramkör-szintetizáló módszereinket nem szabad fetiszizálnunk és újabb lehetőségeket kell keresnünk. Például szolgálhat az emberi agy, melynek elemsűrűsége másfél-két nagyságrenddel nagyobb legbonyolultabb integrált áramköreinknél.

Új megoldásokat jelentenek a már említett funkcionális eszközök. Elég szép

számmal ismerünk ilyeneket, de átfogó információközlő rendszert ezen az alapon kialakítani még nem sikerült, részben az eszközök tökéletlensége, részben a bennünket körülvevő klasszikus rendszerek tömegének lenyűgöző hatása miatt. Az eszközök fejlődésével, új effektusok felfedezésével azonban biztosabb alap keletkezik ahhoz, hogy bátrabban szakítsunk a hagyományos módszerekkel.



7. ábra. Integrált fotodióda-mátrix



8. ábra. Gunn-effektuson alapuló D/A átalakító

puló eszközök. Az egyenáramú impulzusokkal létrehozott mikrohullámú rezgések jelképezik azt a jelenségsoprotot, amely a funkcionális tervezés jövőjét megszabja. A lehetőségekre mutat rá a 8. ábrán látható analóg-digitális átalakító, amely egyszerű mechanikai alakkiképzéssel éri el ennek az egyébként bonyolult áramköri funkciónak a Gunn-effektuson alapuló megvalósítását.

A negatív ellenállás-karakterisztikával rendelkező félvezető eszközök egész sora ismeretes, amelyek csillapítatlan rezgések keltésére alkalmasak és így tulajdonképpen a funkcionális eszközökhöz sorolhatók. Többnyire problémát jelent, hogy nagyobb

Egy ilyen biztató terület az optoelektronika, amely fény és elektromos jelenségek kölcsönhatásán alapszik. Félvezető anyagokkal mind modulált fénykibocsátó, mind fényérzékelő elemek megvalósíthatók diszkrét, csatolt vagy integrált kivitelben. A 7. ábrán látható pl. egy integrált képfelvevő dióda mátrix, amely epitaxiális kristálynövesztési technikával készült. Ismeretesek olyan optoelektronikai rendszerek, amelyek integrált formában tartalmazzák a képfelvevő és erősítő áramköröket és pl. miniatűr tv-kamera megépítését teszik lehetővé. Ugyanúgy integrálhatók lézerdiodák fototranzisztorokkal vagy világítódiodák fotoérzékelő és erősítő áramkörökkel.

Dielektrikum rétegek megfelelően kialakítva hullámvezető módjára viselkednek, segítségükkel a fényt tetszőleges pályán juttathatjuk el a félvezető áramköri rendszer kívánt helyére és használhatjuk elektromos jelek keltésére vagy modulálásra. Ugyanez felületi akusztikus hullámokkal is létrehozható.

A félvezető lézerek elektromos áram által keltett koherens sugárzása, amely elektromos jelekkel modulálható, biztató lehetőség távközlési, adatfeldolgozó és más információs rendszerek létrehozására. Ez a probléma a vezető ipari államokban ma a kutatás előterében áll.

A funkcionális eszközök különleges csoportját alkotják a Gunn-effektuson alapuló eszközök.

sűrűségű integrálásuk a bemenetek és kimenetek elválasztásának nehézségei miatt nehezen oldható meg. Negatív ellenállást és töltéstárolást mutatnak az újabban vizsgált amorf félvezető rendszerek. Utóbbi memória célokra látszik alkalmasnak. Hasonló tárolási effektusok fém—szigetelő—félvezető rendszerekben is ismeretesek. Utóbbiakban fésűszerűen kialakított fém-elektroddal a ráadott feszültség változtatásával inverziós potenciálgödrök alakíthatók ki, amelyekben a töltés tárolható vagy tovább vándoroltatható (charge control device).

Összefoglalva elmondhatjuk, hogy az elektronikai rendszerek áramköreinek integrálásában egy ideig még klasszikus elveket követünk, a legmodernebb technológiai módszereket alkalmazva a maximális elemsűrűség és komplexitás elérésére. A rendszerek fokozódó bonyolultsága miatt azonban egyre inkább előtérbe kerül a funkciók szerinti tervezés és a funkciók megvalósítása a szilárd test térfogati effektusai, az elektromágneses energia különböző megnyilvánulási formáinak összekapcsolása és egymásba való átalakítása útján (optikai-akusztikai-elektromos kölcsönhatások).

A FÉLVEZETŐ KUTATÁS NÉHÁNY PERSPEKTIVIKUS KÉRDÉSE

SZIGETI GYÖRGY és BODÓ ZALÁN

MTA Műszaki Fizikai Intézet, Budapest

A félvezető kutatás az utolsó 20 évben több óriási iparágnak vetette meg az alapját. Az első eredmények megjelenése forradalmasította a hírközlés technikáját, utána került sor a félvezetőknek az erősáramú ipar területén való alkalmazására (pl. félvezető villanymozdonyok) és végül a legutóbbi időkben a számítógépek fejlődésénél tár fel beláthatatlan perspektívát a félvezetők és különösen az integrált áramkörök alkalmazása. A félvezető eszközök évi termelési értéke világviszonylatban kb. 4 milliárd dollárra tehető, a kutatásra és fejlesztésre költött összeg kb. 500 millióra (ezek az összegek a fontosabb vezető ipari államok által deklarált összegek, de igen valószínű, hogy ezen felül tekintélyes összegeket fordítanak a kimutatásokban nem szereplő félvezető gyártmányok előállítására és fejlesztésére is). A félvezető eszközök gyártása nemcsak a szorosan vett félvezető ipart lendítette fel, hanem az alapanyagok, segédanyagok, műszerek és gépi berendezések gyártására is igen nagy hatással volt és rendkívüli módon meggyorsította az anyag szerkezetével kapcsolatos kutatásokat is. Ezen kutatások eredményét a szilárdságtantól kezdve az asztronómiáig és a kémiai technológiáig számos tudományág használja fel. Nagyon nehéz a kutatómunkáról a ráfordítások összegén túlmenő számszerű adatokat megadni, de talán jellemzőnek tekinthető, hogy a Physics Abstracts 1969. II. félévi tárgymutatójában a „félvezető anyagok”, „félvezető eszközök”, „félvezetőkkal kapcsolatos mérések” és „lumineszcencia” címszó alatt 2700-nál több tétel szerepel, nagyságrendben ugyanannyi, mint a „magfizikai” címszó alatt.

Az anyag feldolgozásánál tekintetbe vettem az irodalomban megjelent cikkeket, de főleg a legutolsó években szervezett, 6 nagy nemzetközi konferencia: az 1967-ben Providence-ben a félvezető vegyületeket megvitató, az 1968-as moszkvai félvezető konferencia, az 1969-es novoszibirszki, a felületi jelenségeket tárgyaló konferencia, az 1969-es delawari lumineszcencia konferencia, az 1970-es, Cambridge-ben (Massachusetts) tartott félvezető konferencia és az 1970-ben Budapesten a félvezető rétegszerkezetek tárgyában tartott konferencia anyagát. A kiragadott konferenciák közül 1967-ben Providence-ben kb. 100, 1968-ban Moszkvában kb. 170, 1969-ben Novoszibirszkben 230, 1969-ben Delaware-ban 87, 1970-ben Cambridge-ben (Mass.) 140 és 1970-ben Budapesten 180 előadás hangzott el (az utóbbiból 24 magyar szerzők munkája).

A fontosabb tárgykörök szerint a legtöbb előadás (kb. 430) a felületek és rétegszerkezetek fizikájával foglalkozott; kb. 300 a félvezetők kristályszerkezetét és belső elektronszerkezetét, az energiaállapotok sávstruktúráját, a töltéshordozók mozgását, valamint az energiának a kristály belsejében történő transzportját (exciton-, magnon-, fonon-jelenségek) tárgyalta; kb. 150 előadás kimondottan a félvezetők adott anyagához (félvezető vegyületek; kristályos vagy amorf anyagok) kötött jelenségekkel

foglalkozott; és ez utóbbin belül kb. 30 vitatta meg az amorf félvezetők problémáit, és végül kb. 120 előadás foglalkozott a lumineszcencia jelenségével és a félvezető lézerekkel.

Ez a tematikai felosztás természetesen erőltetett és nem egyértelmű, hiszen pl. azok az előadások, amelyekben a fő hangsúly a félvezető anyagán van, minden esetben valamely jelenséggel foglalkoznak, amely a szóban forgó anyagon észlelhető.

Ha a félvezető eszközökről képet akarunk kapni; úgy vizsgálhatjuk, hogy az ipar milyen alapanyagokból indul ki. A kezdetben gyártott félvezető eszközök túlnyomó része germánium alapanyagú volt, és csak pár éve érte el és szárnyalta túl mennyiségben a szilícium alapanyagú félvezetők gyártása a germániumét. A szilícium félvezető eszközök ma már nagymértékben az epitaxiális planártechnológiával készülnek, de egyes különleges célokra még ma is és a jövőben is előnyösebb lehet a germánium alkalmazása; más területeken pedig előtérbe lépnek a GaAs alapanyagú félvezető eszközök is. Más félvezető vegyületek főleg az optoelektronika és a félvezető fényforrások és lézerek területén kezdenek jelentőséggel bírni.

A gyakorlatban kezdetben polikristályos anyagokat alkalmaztak pl. kristálydetektorok, szelén fényelemek céljaira, míg a ma használt félvezető eszközök majdnem kizárólag egykristályos anyagokból készülnek és csak a legutóbbi időben kerül sor újra polikristályos, vagy amorf anyagok alkalmazására egyes speciális területeken.

A kutató tevékenységet szemlélve pillanatnyilag a legnagyobb jelentősége azoknak a kutatásoknak van, amelyek a jelenleg gyártott eszközökkel kapcsolatosak. Hatalmas erővel folyik az ipari kutatás a szilícium eszközök technológiájának tökéletesítése, a gyártás olcsóbbá és egyenletesebbé tétele, a selejt csökkentése érdekében — pillanatnyilag ezeknek a kutatásoknak az eredménye jelenti a legnagyobb gazdasági hasznot. A közeli jövő szempontjából legfontosabbnak látszik az új eszközök kidolgozására, az integrált áramkörök új formáinak megvalósítására irányuló kutatás.

Mindezen ipari kutatási és fejlesztési munka hazánkban is igen nagy erővel folyik; az OMFB és az ipari kutatóintézetek kimerítő előkészítő munkát végeznek a jövő megalapozása érdekében.

Jelen előadás során arra törekszem, hogy legalább vázlatos képet adjak azokról a kutatási irányokról, amelyeket a félvezetők területén világszerte művelnek, röviden ismertetve ezen kutatások célkitűzéseit és a cél elérésére végzett elméleti és kísérleti munkát és végül rámutassak a mai szemmel a jövőben várható fejlődés irányára.

Ha áttekintjük a felsorolt konferenciákon behatóan megvitatott témaköröket, úgy az első szembeötlő dolog, hogy a technológiára vonatkozólag aránylag kevés előadás hangzott el. Ennek nyilvánvaló oka nem az, mintha a kutatók a technológiával kapcsolatos kutatást nem becsülnék, hanem ellenkezőleg inkább igen magasra értékelik és nem kívánják a gazdaságilag rendkívül fontos és értékes technológiai részleteket közhírré tenni.

Az előadások között mint láttuk a legnagyobb számban a felületekkel kapcsolatos vizsgálatok ismertetése szerepel. Az egész novoszibirszki konferencia főleg felületi jelenségekkel foglalkozott, de több ülészakot szenteltek a felületi jelenségek megtárgyalására a Cambridge-i konferencián is, és tágabb értelemben a felületekkel, a rétegszerkezetű félvezetőkben az egyes rétegek között határfelületekkel foglalkozott a budapesti konferencia is. A felületeknek, az ott lefolyó jelenségeknek

a megismerése alapvetően fontos a félvezetőkön mutatkozó fotoelektromos jelenségek megismerése szempontjából; rendkívül fontos a félvezetők belsejéből felületre jutó töltéshordozók rekombinációja, energiaveszteségeinek felmérése céljából; igen sok esetben a felületek tulajdonságait vizsgálva lehet következtetni a félvezető belsejében lejátszódó folyamatokra is. Igen lényeges szerepe van a félvezető felületeknek az ún. MOS (fém—oxid—félvezető) és MIS (fém—szigetelő—félvezető) eszközök, valamint az ún. FET (field-effect) tranzisztor működésében; úgyszólván csak felületekből állnak az újabban mind nagyobb fontossággal bíró vékonyréteg eszközök.

A felületi jelenségek megismerésének nagy fontossága van azonban a félvezető eszközök megbízhatósága szempontjából is. A félvezető felülete van érintkezésben a külső térrel, tehát a gyártásban és a használat folyamán kívülről jövő hatások elsősorban mind itt érvényesülnek. A felületek vizsgálatára szolgáló módszerek: a fotoemisszió tanulmányozása; a felületi rekombinációs jelenségek vizsgálata; az ún. mikroprobás vizsgálatok, valamint az ún. „scanning” elektronmikroszkóp felhasználása. (E két utóbbinál a felületet igen jól fókuszált elektronnyalábbal tapogatjuk le és a keletkezett röntgen vagy elektrondiffrakciós, illetőleg az elektronmikroszkópi képet használjuk fel vizsgálat céljára.) Az utóbbi években nagy jelentőséget kapott a felület legkülső rétegének megismerése, a kis energiájú elektronsugárral történő vizsgálat (LEED=low energy electron diffraction), továbbá az Auger-féle szekunder elektronos vizsgálat.

A felületek megismerésétől a félvezetők fizikájára vonatkozó ismereteink gyarapításán túlmenően azt is várjuk, hogy a félvezető eszközök használat közbeni stabilitásának további növelésére találjunk módot, mert hiszen az instabilitásoknak egyik fő oka éppen a felületeken lejátszódó reakciókban rejlik. Mindez bőven indokolja, hogy a félvezetőkkel kapcsolatos kutatásoknak ma is, de előre láthatólag a jövőben is egyik fő témája a felületeknek a vizsgálata. Ezt indokolja még az idevágó vizsgálatoknak a ma alkalmazott epitaxiális technológiák szempontjából való fontossága is. A ma gyártott tranzisztorok és integrált áramkörök gyártásánál a legfőbb technológiai momentum valamely alapra egy vékony réteg ránövesztése: szükséges ismerni az alap felületét és a ránövesztett rétegek felületét egyaránt.

Első pillantásra a felületeknél talán még fontosabbnak látszik a félvezetők kristályszerkezetének és belső elektronszerkezetének tanulmányozása. Ismernünk kell a használt félvezető anyagok elektronszerkezetét, a megengedett és tiltott sávok struktúráját, az ún. Brillouin-féle zónákat. Ismerni kell az egyes zónákon belül fellépő, az idegen anyagoktól vagy a kristályhibákból származó lokalizált energiaállapotokat, ismerni kell, hogy ezek mennyiben és mi módon befolyásolják a töltéshordozók mozgását, mi az összefüggés a sáv szerkezet és a kristály által felvehető vagy kisugárzott energia között. Az alapösszefüggéseket már rég feltárták, azonban minden újonnan vizsgált félvezető anyagra újabb és újabb jellemző tulajdonságok bukkannak fel, amelyek ezen anyagok alkalmazási lehetőségeit megszabják, vagy újabb alkalmazási lehetőségeket tárnak fel. Ezek a vizsgálatok vezettek a félvezető lézerek felfedezésére, és ezek alapján várható a jó hatásfokú, folyamatos üzemű félvezető fényforrások kidolgozása is. Ezek a vizsgálatok mutatnak utat arra vonatkozólag, hogy valamely félvezető anyagot vagy eszközt lehet-e pl. gyors működésű berendezésekben használni? Várható-e az adott félvezető mikrohullámú területen való alkalmazása? Ezeknek ismerete szükséges annak eldöntéséhez, hogy milyen irányban folyjék a kutatás a hőenergiának félvezetők segítségével elektromos energiává való

átalakítására, vagy félvezető egyenirányító és vezérlő eszközök alkalmazására magas feszültségek és nagy teljesítmények feldolgozásában.

Ha a félvezetők anyaga szerint nézzük a jelenleg folyó kutatást, mint már említettem, úgy jelenleg a gyakorlat szempontjából a legfontosabb — és valószínűleg a közeljövőben is az marad — a szilícium. A szilícium egykristályokból készített eszközök rendkívül sokoldalúan használhatónak bizonyultak. Megfelelő felületi kezelést alkalmazva rendkívül stabilak, alkalmasak arra, hogy a különféle módszerekkel készülő integrált áramkörök alapanyagául szolgáljanak. Éppen ezért, mert ennyire használható anyagnak bizonyult a szilícium egykristály, az ezzel kapcsolatos kutatások főleg a technológia javítására, a selejt csökkentésére és a megbízhatóság további fokozására irányulnak. Nagy apparátussal folyik a fejlesztő munka a szilícium eszközök tömeggyártását lehetővé tevő, döntő jelentőségű planár technológiához szükséges párologtatási maszkok javítására; a párologtatással vagy kémiai transzporttal készített epitaxiális rétegek tökéletesítésére; a felületeknek különböző védőrétegekkel, oxidokkal, vagy nitridekkel való bevonása érdekében. Behatóan vizsgálják a különböző szennyezők szerepét és az elszennyeződés esetleges keletkezési forrásait. Nagyon nagy jelentőségűeknek látszanak azok a kutatások, amelyek azt célozzák, hogy az esetleges adalékanyagok megfelelő helyre juttatását ion-implantációval végezzék. Az ion-implantációval, az integrált áramkörökkel és a mikroelektronikai rendszerek megbízhatóságával kapcsolatos kutatásokról nem kívánok most részletesebben beszélni, mert hiszen ezek három, most következő előadásnak képezik majd tárgyát.

A félvezető áramirányító és szabályozó eszközök (pl. erősáramú diódák és tirisztorok) ipari gyártása és alkalmazása megoldott kérdés, itt a hatásfok javítása, a méretek csökkentése, az egy fokozattal elérhető feszültség növelése (a megbízhatóság fenntartása mellett) a kutatás fő célja. A hőenergiának közvetlenül elektromos energiává történő átalakítására vagy fordítva, elektromos energiának közvetlenül hűtés céljaira való felhasználásra szolgáló eszközök kutatásánál ugyancsak a hatásfok javítása, az eszközök árának csökkentése és a megbízhatóság, az élettartam fokozása lehet a kutatás fő célja.

Kissé részletesebben kell foglalkoznunk a szilícium mellett a különféle félvezető vegyületekkel is. Ezen vegyületek jelenleg még csak nagyon kevésbé kerültek ipari alkalmazásra, viszont, mint a konferenciák anyagából és a félvezetőkre vonatkozó irodalomból kitűnik, igen sok helyen, aránylag nagy számú kutató foglalkozik ezekkel, melyek fő alkalmazási területe ma még az optoelektronika: vagyis a félvezető fényforrások és fénydetektorok körében mutatkozik.

Bevezetésül itt kell megemlékezni a lumineszcenciával kapcsolatos kutatásokról is. A lumineszkáló anyagok általában két vagy több komponensű félvezető vagy félvezető anyagok, alkalmazásuk a televíziós képcsöveknél, nagynyomású higanygőzlámpák színének korrekciójára szolgáló bevonatoknál ma már nagyipari jellegű. Általában képcsöveknél a cink — kadmiumszulfid bevonatot használják; fénycsövekhez ma a legelterjedtebbek az ún. halofoszfátok (mangánnal és antimonnal aktivált kloro-fluorofoszfátok). Ma a kutatás fő célja a fénytartósság fokozása, valamint a vörös színárnyalatok helyes visszaadása. Az előzőnél az egyes nyomszennyezők kimutatására és kiküszöbölésére irányulnak a munkálatok, az utóbbi vonatkozásban pedig főleg az yttrium vanadátok alkalmazásának kidolgozása a fő cél. A helyes színvisszaadás elérésére ma már a higanygőzlámpáknál, valamint a színes képcsöveknél úgyszólván kizárólag yttrium vanadát fényport alkalmaznak.

A két komponenses vegyületek közül félvezető tulajdonságokat főleg a periódusos rendszer II. és VI., valamint a III. és V. oszlopának vegyületei mutatnak. A II—VI. vegyületek tiltott sávja általában elég széles, így ezek elektromos vezetőképesége kicsiny, többnyire a látható fény számára átlátszóak, megfelelő adalékanyagok alkalmazása mellett jól lumineszkálnak. Az első gyakorlati alkalmazásukat ez utóbbi tulajdonságuknak köszönhetik. A televíziós képernyőnek legfőbb anyaga még ma is a cinkszulfid, illetőleg cink-kadmiumszulfid. Számos kísérlet történt annak érdekében, hogy megvizsgálják ezen anyagok alkalmazhatóságát arra a célra, hogy bennük elektromos tér vagy átfolyó áram hatására fényt gerjesszenek, vagy hogy ezeket félvezető réteg céljaira alkalmazzák. Ezek a kísérletek eddig gyakorlati eredményre nem vezettek. Cink- és kadmiumszulfidok katódsugarakkal való gerjesztése igen jó hatásfokú fénykisugárzásra vezet. A ZnS igen nagy fajlagos ellenállása miatt azonban a közvetlen áramáthaladással való fénygerjesztés, vagy átfolyó árammal gerjesztett ZnS lézer készítése nem járt a kellő sikerrel. Destriau javaslatára egy ideig próbálkoztak a szigetelő anyagba ágyazott cinkszulfid elektromos tér hatására fellépő világítását hasznosítani, azonban ezek a világító testek csak igen kis fénysűrűséget adtak és működésük során fénycsökkenésük rendkívül gyors volt.

Kedvezőtlen vezetőképesége miatt a cinkszulfid lézer céljaira sem bizonyult a legalkalmasabbnak, csak katódsugárgerjesztéssel volt elérhető az u. v.-ban lézerhatás. Ezzel szemben a kadmiumszulfid vezetési és valencia sávja között a látható színek tartományban közvetlen átmenet lehetséges, és így ennél jó hatásfokú lézer effektus várható.

Sok reménnyel biztatnak újabban azok a kísérletek, amelyek ezen vegyületek kristályainak más, pl. III—V alapkristályra való rétegződése útján ún. szuperinjekciót valósítanak meg, vagyis lehetővé teszik a töltéshordozóknak az alaptól a szulfidokba való áthatolását, és ilyen módon kedvező hatásfok elérését. Ezek a kísérletek azonban még eléggé kezdetleges stádiumban vannak. Sokkal sikeresebbek azok a kísérletek, amelyek a III—V vegyületek felhasználására törekсенek. GaAs-del sikerült félvezető lézereket megvalósítani, továbbá jó hatásfokú folytonos sugárzót is. A galliumarzenid tiltottsáv szélessége azonban olyan, hogy a lézer sugárzás is és a folytonos sugárzás is az infravörös tartományba esik. Bizonyos híradástechnikai célokra, így az említett optoelektronikai berendezéseknél ez a sugárzás jól felhasználható. Az optoelektronikus áramköröknél a GaAs sugárzását ugyancsak GaAs vagy Si fotodetektorok veszik fel és így az infravörös fénysugár helyettesíti az egyes helyeken nehezen megvalósítható vezetői összeköttetést. Az infravörös sugárzást sikerült több fotonos gerjesztés útján látható fénné átalakítani ytterbiummal és az erbium csoporthoz tartozó másik aktivátorral aktivált lantanida (Ln, Y, Gd vagy Lu) fluorid foszfor segítségével. Ezen zölden világító fényforrásnak sincs még sok gyakorlati jelentősége a foszfor nagy hőmérséklet érzékenysége miatt. Sikerült azonban jól világító folytonos üzemű diódákat megvalósítani, galliumfoszfid kristályok felhasználásával. Ezeket a diódákat, valamint az említett, a sugárzás átalakítóval ellátott galliumarzenid diódákat számológépek kijelzőinél, vagy más alfanumerikus jelző berendezéseknél kezdik alkalmazni.

Meg kell emlékeznünk a GaAs és a GaP fotocellákról és elektronsokszorozókról is, amelyeknél a félvezető alapra felvitt Cs réteg az eddig ismert fényérzékelőkhöz képest a vörösben és közeli infravörösben kb. tízszer érzékenyebb eszközök készítését teszi lehetővé.

A galliumarzenid látszik egyéb vonatkozásokban is a III—V vegyületek közül jelenleg az elektronika terén való alkalmazáshoz legközelebb állónak. Galliumarzenid eszközökkel, mint pl. Gunn diódákkal sikerült igen nagy frekvenciájú oszcillációkat létesíteni, és így lehetőség van arra, hogy a félvezetők az ultranagy frekvenciás és mikrohullámú területen is alkalmazást nyerjenek. Az idevágó kísérletekről azonban nem kívánok most részletesebben beszélni.

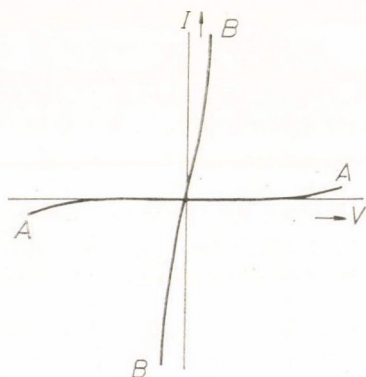
A kettőnél több komponensű félvezető vegyületeknek igen nagy szerepük van a hőenergia elektromos energiává való átalakítása terén. Az első gyakorlati eredményeket az 1940-es évek elején Joffe érte el, akinek sikerült 10—15%-os, az akkori viszonyokhoz képest jó hatásfokú termoelektromos generátorokat készíteni, és ezeket rádió adó-vevő készülékek üzemeltetésére felhasználni. Ezen a területen a mai kutatás feladata abban áll, hogy jó elektromos vezetőképességű, de a hőt rosszul vezető többkomponensű félvezető ötvözetekből létesüljön a hőelem pár. Ma az ilyen elemeket a hőenergia árammá való átalakításán kívül, mint hűtőelemeket is használják.

A hőenergiának, illetve a sugárzó energiának elektromos energiává való átalakításának másik módja az ún. napfényelemek alkalmazása, amelyeknél a félvezető réteg nyeli el és alakítja át elektromos energiává a nap sugárzó energiáját. Ilyen napfényelemeket használnak igen kiterjedten az űrhajózásban.

Az eddig leírt területeken kristályos félvezetők kerültek alkalmazásra. Az utóbbi években az irodalomban egyre több szó esik az amorf félvezetőkéről. A mai ülésen az eredeti program szerint erről a témáról Bodó Zsolt beszélt volna. Távollétében engedjék meg, hogy én ismertessem az erre vonatkozó, általa összeállított anyagot.

S. R. Ovshinsky-nek 1968-ban a Physical Review Letters-ben közzétett publikációja óta az egész világon az amorf félvezető anyagok kutatása előtérbe került. Számos szakember nyilatkozott azóta az amorf félvezetők mellett és ellene. A vélemények jelenleg is nagyon megoszlanak, de az világosan látszik, hogy Ovshinsky-nek

az eredményei legalább is nagy riadalmat keltettek. Mi ennek az oka? Hiszen már régóta alkalmaznak amorf szilárdtesteket a gyakorlati életben, elég, ha az üvegekre gondolunk csak. Bár az amorf félvezető anyagok is régóta ismeretesek és felhasználásra kerültek, csak az utóbbi években van kifejtés alatt az az elmélet, ami megmagyarázná ezek elektromos és optikai tulajdonságait. Ez a munka olyan új és meglepő jelenségek fellépésére vonatkozik, melyekre a kristályos félvezetők körében nincs példa. Noha az utóbbi 50 évben több anyagnál figyeltek meg áram vezérelt negatív ellenállású tartományokat, bizonyos kalkogénid üvegek vékony rétegeiben fellépő „kapcsolási jelenségek” teljesen újaknak mondhatók és az amorf félvezető anyagoknak ezt a tulajdonságát felhasználni tudó eszközök a szilárdtest elektronikában talán a

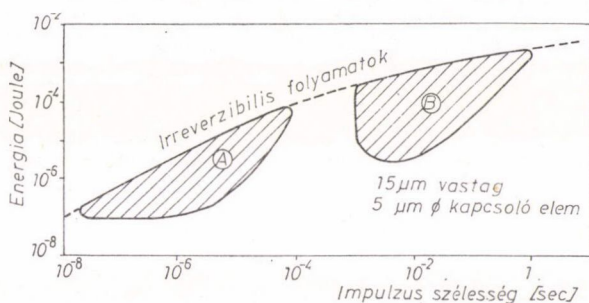


1. ábra

tranzisztor felfedezésével egyenértékű forradalmat jelenthetnek.

A gyakorlati felhasználástól függetlenül azonban a megindult elméleti és kísérleti vizsgálatok ígérnek az „amorf halmazállapotnak” az eddiginél sokkal mélyebb szinten való megismerését is.

Magát az Ovshinsky által felfedezett kapcsolási jelenséget és a róla elnevezett „Ovonic” eszközt a következő ábrákból érthetjük meg. A vékony amorf üvegréteg áramfeszültség karakterisztikája két lényegesen különböző alakot mutathat: Az *A* állapot jól szigetel, a *B* állapot jól vezet. Az egyik a nyitott, a másik a zárt elektromos kapcsolónak felel meg. A felfedezés lényege abban van, hogy alkalmasan megválasztott elektromos impulzusok segítségével „reverzibilisen” a kapcsoló ki-be kapcsolható.



2. ábra

Az ábrán az *A*-val jelölt területre eső impulzus az *A* szigetelő állapotba viszi az anyagot, míg a *B* területre eső impulzus a *B* vezető állapotba. Az impulzusok megszűnése után az anyag tartósan az impulzus által beállított tulajdonságot tartja meg, tehát ideális elektronikus memória tároló, vezérlő stb. elem. Egyes esetekben és anyagoknál 10^{13} ide-oda kapcsolás után sem hibásodott meg az eszköz. Ez azonban csak szerencsés esetben van így pl. egy három komponensű üvegnél az egyik komponensnek 2%-kal való megváltoztatása a meghibásodások számát sok-sok nagyságrenddel megnöveli.

Éppen ezek a megbízhatósági kérdések még nem kikutatottak és a különböző eltérő véleményeknek fő okai. A jelenség jelenlegi legelfogadhatóbb elméleti magyarázata abban van, hogy a beadagolt elektromos energia melegítő és a hőelvezetés hűtő hatásának kombinációja képpen a vékony rétegben hol kis jól elektromosan vezető kristályos csatorna alakul ki, hol meg a hőelvezetés kvencselő hatására ez a kristályos csatorna visszaalakul amorffá. Miként már említettük az elméleti vizsgálatok még jelenleg is folynak és lehetséges, hogy a jelenségnek később más elméleti magyarázata alakulhat ki.

Mindenesetre érdekes, új gyakorlati szempontból nagy jelentőségű jelenségcsoportról lehet szó, melyet bizonyos mértékben érdemes és kell is kutatni.

Melyek az irodalomban pro és kontra felhozott érvek: Az amorf üveg anyagok sokkal olcsóbbak, mint az egykristályos félvezetők. Nem szükséges többszörös diffúzió, epitaxiális növesztés stb. az amorf anyag maga kapcsol. Az amorf eszköz polaritástól független, ami sok új lehetőséget nyújt.

Igen fontos előnye az is, hogy a rádióaktív sugárzásra gyakorlatilag érzéketlen. Ez űrkutatási és katonai szempontból lényeges.

A kapcsolással átlátszó és átlátszatlan állapot is alakul ki bizonyos hullámhosszú fényeknél. Megfelelő keskeny lézer fénnyel 10^{12} bit memória egység kialakítása lehetségei valósíthatók meg.

Érthető, hogy ezek a lehetőségek egyes cégeknél riadalmat keltettek. Sok vezető szakember aggályát is kifejtette. Pl. C. L. Hogarth véleménye az, hogy bár kétségtelenül megvan a jelenség, még igen nagy pénz és idő szükséges ahhoz, hogy használható eszközt lehessen belőle kialakítani. Erős elméleti alapok mellett négy év kellett ahhoz, hogy a jó Si tranzisztort kidolgozzák.

Az Ovonic eszköz működési elve ma még sokkal kevésbé ismert, mint a szilícium félvezetőé 1950-ben. W. S. Boyle azt hangoztatja, hogy a jelenlegi félvezető eszközökben az anyag ára csak kb. 10%-a a gyártmánynak. Nem jelent előnyt tehát az amorf anyagok olcsóbbasága. Más kutatók kiemelik, hogy igen rossz tapasztalatok vannak a reprodukálhatóság területén, kétszer sem sikerül ugyanazt az eszközt megvalósítani stb. stb.

Érvek és ellenérvek tehát vannak szép számban. Úgy látszik, hogy nyugaton elsősorban egyetemi kutatók foglalkoznak az amorf anyagokkal és a nagyobb cégek, talán az előbb említett üzleti érdektől is vezetve negatív véleményüket hangoztatják, bizonyára ezek is folytatnak bizonyos mértékű kutatómunkát ezen a területen.

Hasonlóan célszerűnek látszik, hogy ha nem is túl nagy erővel, de mi is foglalkozunk a félvezető amorf anyagokkal is. A kristályos és amorf félvezető vagy szigetelő rétegek egymásra növesztésével további új, az eddigiekhez képest sok tekintetben különböző félvezető eszközök valósíthatók meg. Így pl. cinkszelenidre növesztett galliumarzenid rétegek segítségével 70-es áramerősítési tényezővel az eddigiekhez képest kb. 5—10-szeres frekvencia határig használható tranzisztort lehetett készíteni. Ugyancsak nagyobb működési sebesség várható a szórt kapacitások lecsökkentése révén a szigetelő alapra felvitt félvezető integrált áramkörök használatával.

Heteroátmenetek alkalmazásával a világító diódák hatásfoka és felületi fényessége lényegesen megjavítható. Elvileg készíthető egy 250 000 világító diódából álló lapos tv-ernyő, ez azonban a jelenlegi III—V vegyületekből készített diódák felhasználása mellett még eléggé rossz hatásfokú, rendkívül drága eszköz volna. Sokkal több lehetőséget nyújt a II—VI rétegekből felépített vagy az alumínium-félvezető ötvözetet tartalmazó rétegszerkezet. Galliumarzenid és gallium-alumíniumarzenid réteggel már 10% hatásfokú 10—100 mA-ig terhelhető folytonos üzemű kristálylámpák készíthetők. Galliumarzenid és alumíniumarzenid rétegekkel előállítottak szobahőmérsékleten zöld fényben világító kapcsolólézereket. A lapos televíziós ernyő megoldásához legközelebb áll az arany-cinktellurid-cinkszeléntellurid-kadmiumszulfid-öndioxid rétegszerkezet, amely keményüveg lapra van felpárologatva. A polikristályos réteg már fekete sárga színű képet adó, jól használható képernyőt ad, a vezérlés integrált áramkörök segítségével történhetik.

Kísérletek folynak a dopoló anyagoknak ion-implantációval való felvitelére. Érdekesnek ígérkeznek azok a rétegszerkezetek is, amelyeknél egy félvezető bázisból nagy térerősség segítségével a vékony szigetelő rétegekben át felgyorsítva jutnak a töltéshordozók egy széles tiltottsávú, jól világító, lumineszkáló rétegbe.

A fentiek alapján úgy látszik, hogy a félvezető kutatás jelenlegi főirányai a következők:

1. A szilícium eszközök gyártási technológiájának javítása a tömeggyártás meggyorsítása, a megbízhatóság fokozása, és az integrált áramköri egység árának csökkentése érdekében.

2. Ion-implantációs technológia bevezetése.

3. Rétegszerkezetek kutatása egyrészt a tranzistorok frekvencia határának növelése, másrészt lapos képernyők és tv-készülékek megvalósítása céljából.

4. Lumineszkáló anyagok tökéletesítése, jobb fényforrások megvalósítása érdekében.

5. Amorf, üveges félvezető anyagok kutatása félvezető memória egységek és kapcsoló elemek megvalósítása céljából.

A felsoroltak közül a 1. és a 4. alatt említett kutatások eredményei hatásukat már most közvetlenül érvényesítik a termelésben; a 3. és 5. alatt említettek laboratóriumi szinten néhány év múlva adnak a reprodukálható megvalósítás lehetőségéről képet és további évek kellenek (a laboratóriumi kísérletek pozitív eredményét feltételezve) az ipari megvalósításhoz. A 2. alatt említett ion-implantáció már most is érdekes eredményeket mutat, gyakorlati alkalmazására ma még a költséges volta miatt nem került sor.

A félvezetők kutatásában és alkalmazásában az utolsó 20 év döntő sikert hozott, a közeli évek feladata láthatóan kezd már kibontakozni, de éppúgy, mint a tranzistor felfedezése előtt egy-két évvel nem lehetett előre látni azt az óriási forradalmi változást, amit a félvezetők használata a híradástechnikában jelentett, ugyanúgy nem tudjuk most felmérni az esetleges váratlan új felfedezések horderejét pl. a számítástechnika, vagy az energia termelés területén.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. III. 10. — Terjedelem: 7,35 (A/5) ív

71-2866 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Kiskereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

Pócsik György: A Wightman-elmélet általánosításai, nempolinomiális Lagrange függvények. V. 399

A SZILÁRDTESTFIZIKA FEJLŐDÉSÉNEK VÁRHATÓ IRÁNYAI

<i>Beleznay Ferenc</i> : Fém-félvezető átalakulás jelensége és időszerű problémái	411
<i>Mezei Ferenc</i> : Ion-implantált szennyezések szilárd testekben	419
<i>Pál Lénárd és Zimmer György</i> : Mágneses anyagok fizikájának időszerű kérdései	427
<i>Prohászka János</i> : A fémek mechanikai tulajdonságainak várható fejlődése	435
<i>Stefán Mihály</i> : Néhány iparilag fontos színesfém fizikájának időszerű kérdései	451
<i>Szép Iván</i> : Az áramkör-integrálás elveinek és módszereinek fejlődési irányai	465
<i>Szigeti György és Bodó Zsolt</i> : A félvezető kutatás néhány perspektivikus kérdése	473

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

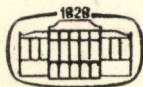
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XIX. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1971

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A RADIOAKTÍV FELEZÉSI IDŐ MEGVÁLTOZTATÁSA KÉMIAI, ILLETVE FIZIKAI BEHATÁSOKKAL

KEMÉNY PÉTER

1. Bevezetés

A 20-as évek elejéig főleg Mme Curie és munkatársai munkái nyomán kialakult az, a fizikusok tudatában sokáig élő vélemény, hogy az atommag sajátosságait külső erők nem befolyásolják.

Több mint két évtizednek kellett eltelnie ahhoz, hogy néhány látványos felfedezés, illetve a magspektroszkópiában meghonosított mérőmódszer erősen megtépázza ezt a hiedelmet. Gondolunk itt elsősorban a Mössbauer-effektus felfedezésére, a mágneses, illetve kvadrupól magrezonancia módszerének kidolgozására, valamint a perturbált szöggkorrelációs mérések szilárdtestfizikai, illetve kémiai alkalmazására. Ezen módszereknek az a közös vonásuk, hogy a mag egyes energianívói (az alapállapotot is beleértve) eltolódhatnak, illetve felhasadhatnak több alnívóra a külső elektromos, illetve mágneses behatás következtében és ezen változások közvetlen vagy közvetett méréseiből következtetni lehet a kölcsönható erők jellemzőire.

A radioaktív felezési idő megváltoztathatatlansága azonban továbbra is élt a köztudatban — „iskolában is így tanítják” —, bár a kétkedés magvait talán ezen a területen hintették el a legkorábban [3], [4].

1947-re már minden radioaktív bomlástípusnak megvoltak mind a kísérleti bizonyítékai, mind a nagyjából kidolgozott elmélete. Ekkor vetődött fel az a gondolat, hogy azon bomlástípusoknál, ahol az átmeneti valószínűségben az atomi hullámfüggvények is szerepelnek, ez utóbbiak megváltoztatása magának az átmeneti valószínűségnek, λ -nak, illetve a $T_{1/2} = \ln 2 / \lambda$ összefüggés alapján a felezési időnek a változását eredményezheti. Ezen bomlástípusok az elektronbefogás és a belső konverzió.

Mint a továbbiakban látni fogjuk, a kb. két évtized alatt felhalmozódott kísérleti anyag azt bizonyítja, hogy a kémiai változásokat a legbelső elektronhéjak is érzékelik. Tarthatatlan tehát az a felfogás, hogy a kémia nem más, mint a legkülső elektronhéj fizikája. A klasszikus értelemben vett fizika és kémia között sokkal bonyolultabb az összefüggés, az elhatárolást nem lehet egyik vagy másik elektronhéjra korlátozni, mert a külső behatások az egész atomot érintik, s az ilyen vagy olyan jelenségek csak jobb—rosszabb közelítéssel válogathatók szét.

Bár ez a témakör mind „fizikus” mind „kémikus” szemmel nézve nagyon érdekes, eddig csak két részleges összefoglaló cikk jelent meg [1], [2]. Jelen összefoglaló a témakör egészét igyekszik felölelni az 1970-es év közepéig megjelent irodalmi adatok alapján. A tárgyat bomlástípusok szerint kívánjuk csoportosítani, azon belül pedig elválasztani igyekszünk a kémiához, illetve fizikához kapcsolódó eredményeket.

2. Elektronbefogás

Bár a felezési idő elektronbefogás esetén kimutatható megváltoztatását célzó mérések a legkézenfekvőbb esettel kezdődtek, a kezdeti mérések pontosságának a növelésén még nem sokkal jutottak túl.

Két csoport végzett méréseket a Be^7 -es izotópon: az *R. Daudel* vezette párizsi és az *E. Segre* vezette amerikai csoport.

A Be^7 -nek számos előnyös tulajdonsága van: az elektronbefogást egy könnyen detektálható 450 keV-es γ átmenet követi, a felezési idő értéke — 52,9 nap — még nem túl kényelmetlen a mérés technika szempontjából. Döntő érv volt, hogy a berillium a legegyszerűbb elem, melynek elektronbefogással bomló izotópja van, tehát a mért adatokat elméletileg is könnyen lehet követni.

Ez utóbbi feltevésre erősen rácafol mind az elméleti adatok nagy szórása, mind pedig az a tény, hogy a kísérleti adatok kb. egy nagyságrenddel kisebbek az elméletiekénél.

Kísérletileg legegyszerűbbnek látszott a Be atom négy elektronjából kettőt egy erősen elektronegatív atommal „lefejtetni”, például BeF_2 alakjában, hol a berillium mint Be^{++} szerepel. A Be^{++} és Be állapotok esetén az átmeneti valószínűségek, illetve a felezési idők közötti relatív különbség a

$$\frac{\Delta T_{\frac{1}{2}}}{T_{\frac{1}{2}}} = 1 - \frac{|\Psi'_{0K}|^2}{|\Psi_{0K}|^2 + |\Psi_{0L_I}|^2} \quad (1)$$

képlettel írható le, ahol a zéró index azt jelenti, hogy az elektronsűrűségeket csak a mag térfogatában kell tekintetbe venni, a vessző pedig a K héj ionizáció utáni állapotára utal.

A számítások 1,6—1,8 [5], [7], illetve 2,6—3,3%-os [6], [7], [8] változást jósoltak aszerint, hogy Slater, illetve Hartree—Fock (+ kicserélődési kölcsönhatás) hullámfüggvénnyel dolgoztak.

Figyelembe véve, hogy a Be fémekben az L pályák 50—50%-ban s—p hibridizáltak, valamint azt, hogy a Be—F kötés, — mint az a Pauling-féle elektronegativitási táblázatból kitűnik — csak 87%-ban ionizált, $\Delta T_{\frac{1}{2}}/T_{\frac{1}{2}}$ értéke a korábbi 3% körüli értékről 0,8 [10], [11] — 1,3 [7], [9] %-ra apadt.

A kísérleti értékek azonban makacsul tartották magukat a 0,08 [8], [10], [12], [13] — 0,12 [9], [14] % tartományban.

A — hullámfüggvényértékeket is felhasználó, de kvalitatív — magyarázatot *F. Seitz* adta meg. (Idézve [8]-ban.) Tulajdonképpen a Be/BeO mérés eredményt magyarázva teszi fel, hogy a Beszomszédságába kerülő, voluminózus elektronszerkezettel rendelkező atom megnöveli a Be mag körüli elektronsűrűségét. Tehát hiába a nagy elektronelvonóképesség (F^- , O^{--}), ha éppen a viszonylag nagy töltéskülönbség hatására az atomok közötti távolság ugyanakkor lerövidül, s így a szomszéd atom elektronfelhőjének a jelenléte lerontja a várható efféktust.

Sajnos, ez a magyarázat sok kívánni valót hagy maga után — meglehetősen el is avult (1949) — mint a Be^7 felezési idő változásával foglalkozó legújabb [15], igen gazdag kísérleti anyagot felsorakoztató cikkel való összehasonlításból azonnal kitűnik. Az említett cikk eredményei kizárnak minden eddigi magyarázatot, sőt, sajnos, itt-ott

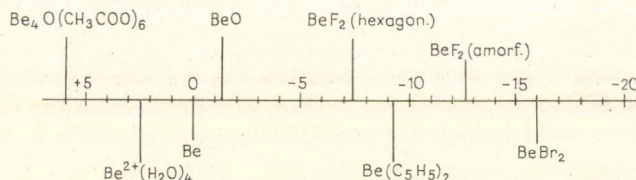
önmaguknak is ellentmondanak. A különböző berillium-vegyületekben mért bomlásállandókra ugyanis a következő növekvő sorrendet állapították meg:

$$\lambda(\text{Be}_4\text{O}(\text{CH}_3\text{COO})_6) > \lambda(\text{Be}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_4) > \lambda(\text{Be}) > \lambda(\text{BeO}) >$$

$$\lambda(\text{BeF}_2 \text{ hexagon.}) > \lambda(\text{Be}(\text{C}_5\text{H}_5)_2) > \lambda(\text{BeF}_2 \text{ amorf}) > \lambda(\text{BeBr}_2)$$

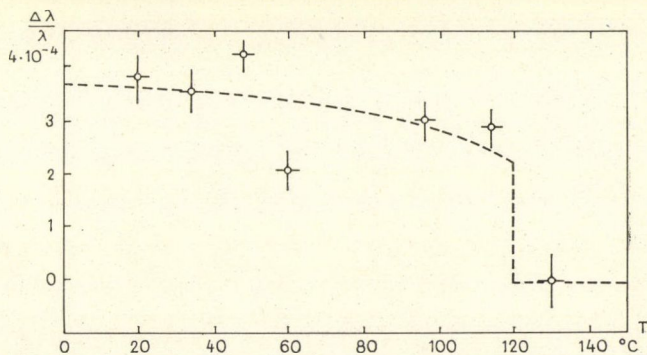
Ezt a sorrendet lehet részleteiben magyarázni a környezet elektronegativitásának a növekedésével, vagy az atomközi távolságok csökkentésével, egészében azonban még a fenti két tulajdonság együttes figyelembevétele sem ad kielégítő magyarázatot, hogy miért épp így helyezkednek el a fenti sor tagjai.

Kísérleti tény például, hogy $\lambda(\text{BeF}_2 \text{ hexagon.}) > \lambda(\text{BeF}_2 \text{ amorf})$, ugyanakkor a Be—F atomtávolság: $x(\text{Be—F hexagon.}) > x(\text{Be—F amorf})$. Ez homlokegyenest ellenkezik *F. Seitz* magyarázatával, miszerint a szomszéd atom közelebb kerülve az illető maghoz, növelné az elektronsűrűséget annak térfogatában. Sajnos, a $\lambda(\text{BeBr}_2)$ elhelyezkedése nem magyarázható egyik feltevessel sem (elektronegativitás, atomtávolság, ill. a kettő kombinációja), ezért a szerzők azt tanácsolják, hogy ne próbálkozzunk a fenti eredményeket a Be kémiájából ismert egy vagy két állandó számértékével magyarázni, hanem fogadjuk el úgy, ahogy van, mint az elektronsűrűségnek egy skáláját a Be mag környezetében.



1. ábra. Elektronsűrűség a berillium-mag környezetében különböző Be vegyületekben (empirikus beosztás).

A kémiai szerkezetkutatás mellett a szilárdtestfizikában is felhasználható a felezési idő megváltozását felhasználó módszer. A bázeli egyetemen *P. Huber* és munkatársai a ferroelektromos BaTiO_3 kristályba beépített Zr^{89} felezési idejét mérték a ferroelektromos Curie-pont fölé (kb. 120°C) felhevített $\text{Zr}^{89}/\text{BaTiO}_3$ forrással össze-



2. ábra. Ferroelektromos BaTiO_3 -ba beépített Zr^{89} bomlásállandójának relatív változása a hőmérséklet függvényében.

I. táblázat

	Mag, $T_{1/2}$	Elektron- befogás aránya	Detektált sugárzás	Kémiai/fizikai állapotok			$\lambda_1 : \lambda_2 : \lambda_3$	Irodalom*
				1	2	3		
1.	Be ⁷ 53 nap	100%	477 keV, γ	BeO S	Be Me	BeF ₂ S	99,985 : 100 : 100,84 $\pm 0,009$ $\pm 0,10$	[8] , [12] [5]—[15]
2.	Cu ⁶⁴ 12,8 óra	43%	511 és 1340 keV, γ	CuNH ₃ 4 SO ₄ Aq	Cu Me	CuSO ₄ Aq	99,13 : 100 : 101,70 $\pm 0,30$ $\pm 0,64$	[19]
3.	Zr ⁸⁹ 78,4 óra	77%	910 keV γ	BaTiO ₃ Zr ⁸⁹ ferroelektromos (20 °C)	BaTiO ₃ /Zr ⁸⁹ normál (120 °C)		99,920 : 100 $\pm 0,003$	[17] [16]

* Megjegyzés: az „Irodalom” rovatban minden cikket idéztünk, amely a megfelelő mag felezési-idő változásáról adatot, illetve elméleti számítást közöl.

A $\lambda_1 : \lambda_2 : \lambda_3$ rovatban idézett számszerű adatokat — természetesen nem ilyen formában — a felső sorba írt cikkek tartalmazzák (ha több cikk is van).

Rövidítések jegyzéke:

S = szilárd

Me = fém

Aq = vizes oldat

G = gáz

hasonlítva [16], [17]. Azt tapasztalták, hogy ferroelektromos állapotban a felezési idő mintegy $(0,08 \pm 0,003)$ %-kal nagyobb, mint a Curie pont felett, az elektromos polarizáló tér tehát mintegy „leszívja” a beépült Zr atom elektronjait. A felezési idő változásának hőmérsékletfüggéséből a ferroelektromos Curie pontot is meg lehet állapítani.

A fenti körülményeknél sokkal „tisztábbnak” ígérkeznek azok a mérések, ahol az illető atom egyik fizikai állapota kvázi szabadnak mondható (pl. a javasolt Be fém) Be gőz rendszer, [18] vagy fém (fémion vizes oldatban rendszer).

Ilyen esetben elmaradnak a [8]-ban említett zavaró hatások és a kémiai környezet behatása elektronbefogással bomló nehezebb magok esetén is kimutatható lesz [19].

Réz esetén az atomtérfogat kb. 4,7-szerese a Cu^{++} iontérfogatnak, ezért a várható effektus iránya megegyezik a mért értékkel.

Sajnos, más elektronbefogással bomló magon nem végeztek kísérleteket, annál gazdagabb azonban a belső konverziót kihasználó mérések kísérleti anyaga.

3. Belső konverzió

A mag gerjesztett állapotainak a lecsengése elvben mindig egyszerre két utat követhet: a fölös energia γ -sugarak formájában távozik, vagy a másik lehetőség, hogy az energiát közvetlenül valamelyik atomi elektron veszi át és távolítja el kinetikus energia formájában. Ez utóbbi jelenséget nevezzük belső konverzióknak és mivel itt a mag és az elektronhéj kölcsönhatása révén jön létre a magátmenet — az átmeneti valószínűségben az atomi elektronok hullámfüggvényei explicite szerepelnek — várható, hogy az összátmeneti valószínűség, illetve a felezési idő kémiai, vagy fizikai módszerekkel befolyásolható lesz. Két szempontból is „szerencsés” kell legyen egy ilyen magátmenet, hogy számunkra szóba jöhessen. A lecsengés túlnyomórészt — ha lehet teljesen — a belső konverziós ágat kövesse és az átmeneti energia legyen elég kicsi ahhoz, hogy a folyamat a vegyértékelektronokat, illetve a velük szomszédos elektronpályákat érintse.

Kísérletileg nem megvetendő szempont az sem, hogy a felezési idő a mérés technikailag könnyebben elérhető 10^{-9} sec 100 nap tartományba essék és a bomlást valamilyen jól detektálható sugárzás kövesse.

Az első kísérletek a $\text{Tc}^{99\text{m}}$ -es, 6 órás felezési idejű izotópján történtek [20] és ez az egyetlen eset ennél a bomlástípusnál, melynek az eredményeit elméletileg is megpróbálták magyarázni [21] [22].

Mivel itt magas multipólátmenetről (E3) és alacsony energiáról (2,15 keV) lévén szó a γ átmenet elhanyagolható a belső konverzió mellett és az átmeneti valószínűség a belső konverziós együttthatóval — α -val — lesz arányos.

$$\lambda \sim \alpha \sim N \sum_i |\langle f | \hat{H} | i \rangle|^2, \quad (2)$$

ahol „N” a magtól függő tényezőket összesíti, „i” és „f” az elektron hullámfüggvényei a kezdeti és végállapotban, \hat{H} a kölcsönhatási Hamilton függvény.

Slater [21] a végsőig leegyszerűsítette a problémát, a geometriai faktorokat szeparálva és a $V = 1/r^{l+1}$ magpotenciált használva az

$$\alpha \sim \int e^{ikr} \frac{1}{r^2} R_M dr \quad (3)$$

összefüggésre jutott, ahol az integrálban szereplő szabadelektronos tag egyszerű síkhullám, míg R_M a kötött elektron hullámfüggvényének a szabad Tc atom Thomas—Fermi potenciáljából kiszámolt radiális része.

[22]-ben valamivel egzaktabb módon a magpotenciál helyébe a — vektorpotenciált elhanyagolva — az L-ed rendű Hankel gömbfüggvény kerül. Az „i” állapotra a fémekre alkalmazott Thomas—Fermi potenciálból egy egy lépéses SCF módszerrel — melyet a szerzők Self-potential correction (SPC) — módszernek neveznek — állítják elő a hullámfüggvényt.

Sajnos, a szilárd testben a külső elektronok níói sávokká szélesednek, melynek figyelembevétele bizonytalanságot okoz az egyes elektronpályák belső konverzióhoz való járulékanak a megállapításában.

Még két érdekessége van ezeknek a számításoknak éspedig az, hogy az s elektronok járuléka elhanyagolható (az integrál előjelet vált a tartomány közepén), valamint az, hogy a kölcsönhatás a mag méreteihez képest óriási tartományra terjed ki ($1-2.10^{-9}$ cm).

A két eredmény, mint a II. táblázatból látható, nem nagyon egyezik. Ennek ellenére

[22] a nagy nyomásnak kitett Tc fémbe mért $(2,3 \pm 0,5)10^{-2}$ %-os felezési idő csökkenést kielégítően magyarázza.

[21] és [22] közös eredménye, hogy *amennyiben a nukleáris és a kémiai (fizikai) behatások egymástól távolabb álló elektronhéjakat érintenek, a felezési idő változásának irányát és nagyságát az atomtávolságok, illetve a kristályszerkezeti állandók határozzák meg.* A szomszédos atomok kémiai jellege tehát csak áttételesen befolyásolja az eredményt.

Ezt támasztják alá a Te^{125m} -en végzett mérések is, [23] hol a $\lambda_{\text{Te}} > \lambda_{\text{Te0}} > \lambda_{\text{Ag2Te}}$ sor nem az $\chi_0 > \chi_{\text{Te}} > \chi_{\text{Ag}}$ elektronegativitási sort követi, hanem a közepes atomtávolsággal csökken.

Lényegében ugyanilyen eredményre vezettek a Nb^{90m} -en [24], [25] Pt^{193} -an [26] és Xe^{131m} -en [27] végzett mérések is. Ezekben az esetekben szilárd-oldatot-, szilárd-szilárd-, illetve szilárd-gázfázisokban levő preparátumokat hasonlítottak össze, és a tapasztalat azt mutatta, hogy mindig a lazább szerkezetű anyagban jelenlevő izotóp bomlott el lassabban.

Más a helyzet akkor, ha a belső konverzió túlnyomórészt a valenciaelektronokat vagy az ezzel szomszédos elektronpályákat érinti. Ebben az esetben a kémiai környezet, közelebbről a szomszédos atomok elektronegativitása a döntő, éppúgy mint az előző §-ban tárgyalt Be^7 esetében.

Minél nagyobb a szomszédos atom elektronegativitása, annál lassabban bomlik az „ilyen szomszédságba” került izotóp. Sajnos, csak a 26 perces felezési idejű U^{235m} sorolható egyelőre ebbe a kategóriába. Japán kutatók bebizonyították [28]—[30], hogy ebben az esetben a felezési idők a szomszédos atom elektronegativitásának megfelelő mértékben változnak, azaz párhuzamba lehet állítani az $X_c > X_{\text{Si}} > X_{\text{U}}$ sort a $T_{\frac{1}{2}}(\text{UC}) > T_{\frac{1}{2}}(\text{USi}) > T_{\frac{1}{2}}(\text{U})$ sorral. Az U^{235m} forrást vékony Pu^{239} preparátumból kilökött uránium atomok „összegyűjtése” révén nyerik. A kollektor

II. táblázat

Elektron- héj	Átmeneti valószínűséghez való %-os járulék	
	[21]	[22]
3p	60	38
3d	27	53
4p	10	5
4d	3	1
	100	97

kémiai természete és az urán felezési ideje közötti összefüggésekre végzett beható kísérleteket M. Néve de Mevergnies belga kutató is [31], [32].

Megállapítást nyert [33], hogy az átmeneti energia olyan kicsi, hogy a belső konverzió csak a — valenciaelektronokat is tartalmazó — P és Q héjakon mehet végbe, ezért % nagyságrendű eltérések mutathatók ki.

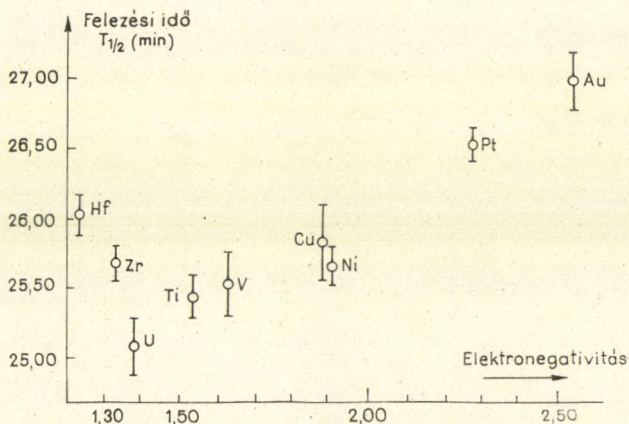
A kollektor elektronegativitása és a felezési idő között meglepően szép lineáris összefüggés tapasztalható, ha a preparátumot vákuumban készítették. Ha argon atmoszférában történt az U^{235m} preparátum előállítása akkor — valószínűleg a felületi jelenségek következtében — ez az összefüggés rendszertelenné válik.

A további kísérletek [34] azonban kissé bonyolulttá tették a fentebbi összefüggéseket. Megállapítást nyert, hogy az elektronegativitás-felezési idő diagram 2 egyenes szakaszból áll. Az U-nál az effektus előjelet vált és a két egyenes szakasz iránytangensének az abszolút értéke is különböző.

A szerző szerint [34] a „kémiai” hatás csak az U atomnál nagyobb atomsugarú elemek környezetében — tehát ahol az U atom „elfér” — jelentkezik (a 3. ábrán az U-tól balra). Ellenkező esetben az U atom „szorul” a kristályrácsban, ezért a 6p elektronok magasabb pályákra kényszerülve eltávolodnak s így a felezési idő megnövekszik. Ezt a szerző „szilárdtestfizikai” effektusnak nevezi. Ide sorolhatnánk a japán kutatók korábbi méréseit is [28]—[30].

Sajnos, épp ez, a korábbiaknak ellentmondó magyarázat teszi nyílttá a kérdést, melyet csak kémiai módszerekkel felépített uránvegyületek tanulmányozásával lehetne eldönteni.

Mint az elektronbefogás esetén, itt is fel lehet használni a felezési idő eltolódásának módszerét „tisztá” fizikai méréseknél.



3. ábra. U^{235m} felezési ideje a kollektor átlagos elektronegativitásának a függvényében.

Az egyik ilyen méréscsoport a szupravezetés jelenségét mutató egyes fémek szupravezetési és normál állapotai között mutatott ki felezési idő különbséget. Az eredmények első pillanatban meglepőek, a technécium [35] szupravezetési állapotban gyorsabban, a nióbbium [36] lassabban bomlik, mint normál állapotban ugyanazon a hőmérsékleten. Ezt [36] azzal magyarázza, hogy míg a Tc^{99m} E3-as átmenettel, addig

III. táblázat

	Mag, $T_{1/2}$	Átm. energ. (keV) és átm. típ.	Legalsó pálya	Detektált sugárzás	Kémiai fizikai állapot			$\lambda_1 : \lambda_2 : \lambda_3$	Irodalom*
					1	2	3		
1.	$\text{Te}^{125\text{m}}$ 58 nap	109; M4	K	27 keV X 109 keV γ	Te Me	TeO_2 S	Ag_2Te S	100 : 99,9964 : 99,9741 $\pm 0,0017 \pm 0,0018$	[23]
2.	$\text{Xe}^{131\text{m}}$ 12 nap	164; M4	K	164 keV γ	Xe S (-183 °C)	Xe G (20 °C)		103,2 : 100 $\pm 1,1$	[27]
3.	$\text{Tc}^{99\text{m}}$ 6 h	2·15; E3	M_I	140 keV γ	KTcO_4 S	Tc Me	Tc_2S_7 S	100 : 99,76 : 99,73 $\pm 0,01 \pm 0,01$	[20] [21], a, b
4.	$\text{Nb}^{90\text{m}}$ 24 s	2·38; M2	L_{III} (L_{II})	122 keV γ	Nb Me	$[\text{NbF}_7]^{=**}$ Aq		100 : 96,4 $\pm 0,4$	[24] [25]
5.	Pt^{193}	1·64; M1	N_I	konverziós elektr. (0,9 keV-es N_I vonal)	Au	AuCl_3		100 : 96,0 $\pm 2,0$	[26]
6.	$\text{U}^{235\text{m}}$ 26 perc	30 eV; E3 (M4)	P_{III} (P_{II})	konverziós elektr.	U Me	USi S	UC S	100 : 99,779 : 99,682 $\pm 0,036 \pm 0,050$	[30] [28], [29], [31] [32], [34]
7.	$\text{Tc}^{99\text{m}}$				Tc (1 atm) Me	Tc (10 ⁵ atm) Me		100 : 100,023 $\pm 0,005$	[37]
8.	$\text{Tc}^{99\text{m}}$				T norm. Me	Tc szupra- Me vezető		100 : 100,063 $\pm 0,007$	[35]
9.	$\text{Nb}^{90\text{m}}$				Nb norm. Me	Nb szupra- Me vezető		100 : 99,805 $\pm 0,055$	[36]

a) K. T. Bainbridge, M. Goldhaber, E. Wilson, Phys. Rev. 84 1260, 1951

b) B. S. Dzhelepov et al. ([2]-ben idézve)

* Irodalom „Megjegyzés” lásd az I. táblázaton.

** Valószínű összetétel

a Nb^{90m} valószínűleg M2-es átmenettel cseng le és az átmeneti mátrixelemek előjele különböző lehet. Maga a kísérleti tény arra utal, hogy a szupravezetés, legalábbis az átmeneti fémek tartományában az atomtörzs elektronjait is befolyásolja.

Másik érdekes kísérlet a nagy nyomásnak (0,1 megabár) kitett Tc fémbe mutatott ki [37] mint az várható is volt néhány század %-os felezési időcsökkenést. A fizikai problémán túlmenően ennek a kísérletnek még az is az érdekessége, hogy ebben az esetben végeztük el az eddigi legaprólékosabb számításokat [22].

β -bomlás

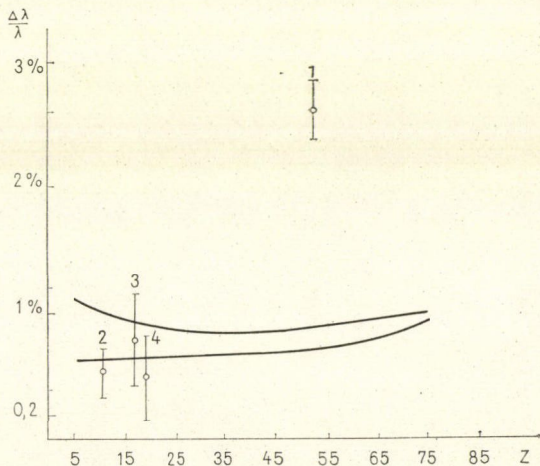
A Sienai Egyetem kutatócsoportjától [38] jelent meg 1967-ben az első cikk, mely a β -bomlás befolyásolhatóságára utal. Sajnos, kvalitatív magyarázat és számszerű adatok nélkül. Azt tapasztalták, hogy a J^{131} kristályos NaJ-ban gyorsabban bomlik, mint a NaJ vizes oldatában. Utána mérve [27], [39] azt tapasztalták, hogy az effektus valóban létezik, ha csak mindhárom csoport nem követte el ugyanazt a szisztematikus hibát. Ellenkező töltésű β bomló ionokon végzett további mérések [40] — ugyanolyan kristályos/vizes oldat rendszerben — azt mutatták, hogy töltésváltozás esetén az effektus is előjelet vált.

Ennek a jelenségnek két lehetséges magyarázata van. Az egyik az elektronképződés folyamata [18]. Eszerint a β részecskék egy hányada nem hagyja el az atomot, melyben képződött, hanem beépül annak elektronszerkezetébe. Ezen folyamat annál valószínűbb, minél kevesebb elektronja van a szóban forgó atomnak (molekulának). *Sherk* szerint [41] pl. ezen folyamat részaránya trícium atomban 0,65, míg trícium molekulában 0,35 %. Az átmeneti valószínűségek különbsége a két anyagban tehát 0,3 % körül kellene mozogjon. Sajnos, ennek a jelenségnek a valószínűsége az atomszámmal — Z-vel — rohamosan csökken és aligha vehető figyelembe a Z = 53 (jód) esetében.

A másik elképzelés szerint az árnyékolási korrekció helyes számításával, illetve a bomló mag helyén létező tényleges Coulomb-tér figyelembevételével lehetne megmagyarázni elméletileg ezt a jelenséget. Az eddigi számítások ugyanis [42], [43] csak a szabad atom elektronjait vették figyelembe. Az árnyékolási korrekció minden esetben csökkenti az effektív magtöltést, illetve növeli a β -bomlás valószínűségét. Ez a korrekció néhány tized %-al növeli λ értékét.

A Fermi-függvény (mely arányossági tényezőként szerepel λ kifejezésében) fizikai értelme azonban

$$F(Z, W) = \frac{|\Psi_{\text{coul}}|^2}{|\Psi_{\text{szabad}}|^2} \quad (4)$$



4. ábra. β -bomlásállandó relatív változása az effektív magtöltés 0,2 egységnyi feltételezett megváltozása esetén a magtöltés függvényében. Felső görbe 0,2 MeV, alsó görbe 2 MeV végpontenergiánál. 1: J^{131} [27], 2: Na^{24} [40], 3: Cl^{38} és 4: K^{42} [előzetes adatok].

IV. táblázat

Mag, $T_{1/2}$	β - bomlás %	Végpont energia, bomlástípus	Detektált sugárzás	Kémiai állapot		$\lambda_1:\lambda_2$	Irodalom*
				1	2		
J^{131} 8 nap	100	606 keV megengedett 330 keV megengedett	80,364, és 637 keV	NaJ S	NaJ Aq	102,64:100 $\pm 0,24$	[27] [38], [39]
Na^{24} 15 óra	100	1,39 MeV megengedett	2754 keV 1368 keV	NaCl S	NaCl Aq	99,48:100 $\pm 0,20$	[40]

* Irodalomban „Megjegyzés” lásd az I. táblázaton.

azaz a mag helyén levő térben mozgó elektron és a szabad elektron sűrűségének a hányadosa.

A szomszédos pozitív v. negatív ionok tere a mag helyén ugyanúgy hat, mint az atom saját elektronjainak a tere, azaz csökkentheti, illetve növelheti az effektív magtöltést. A Fermi függvény azonban eléggé érzékeny a magtöltésre. (Kevésbé érzékeny a β spektrum végpontenergiája) várható tehát, hogy a különböző töltésű szomszédok esetén különbözőképpen viselkedjék.

A 4. ábrán az integrált Fermi-függvény relatív megváltoztatását tüntettük fel a rendszám függvényében, abban az esetben, ha az effektív magtöltés 0,2 egységgel változna meg. A magtól függő tagokkal, valamint az erősen energiafüggő integrálakkal egyszerűsíthetünk, tehát [43]

$$[f(Z, W_0) - f(Z + 0,2, W_0)]/f(Z, W_0) = \Delta\lambda/\lambda, \quad (5)$$

ahol W_0 a β spektrum végpontenergiája.

Ezen feltevések kísérleti bizonyítéka az lenne, ha ugyanennek a jelenségnek a fordítottját lehetne kimutatni — mint ahogy az a Fermi függvények viselkedéséből következne — pozitronbomlás esetén, azaz ha a pozitív töltésű ionok növelnék, a negatív töltésűek pedig csökkentenék felezési idejüket kristályos anyagban a vizes oldatukhoz képest.

4. §. Befejezés

Jelen dolgozat összefoglalja a radioaktív felezési idő fizikai, ill. kémiai módszerekkel előidézett megváltoztatásában eddig elért eredményeket. Mindhárom bomlástípus — elektronbefogás, belső konverzió, β -bomlás — esetén születtek érdekes eredmények. A finomabb kémiai — kristályszerkezeti hatások a 10^{-2} – $10^{-5}\%$ tartományban bújnak meg, a mérés technika mai teljesítőképessége pedig csak alig jutott túl a tartomány felső határán. (10^{-2} – $10^{-3}\%$).

Az elmélet teljesen lemaradt erről a témakörrel. A legegyszerűbb eset — a Be^7 — kivételével csak két, ma már 19, ill. 10 éves cikk próbálja anyagszerkezeti számításokkal is követni a kísérleti eredményeket. Megfelelő elmélet kidolgozása és a mérések pontosságának a növelése azonban egy új, hasznos módszerrel gazdagíthatná a szilárdtestfizikai, illetőleg a kémiai szerkezetkutatás módszereinek arzenálját.

IRODALOM

1. S. De Benedetti, F. De S. Barros, G. Hoy, Ann. Rev. Nucl. Sci. Vol 16, 31, 1966.
2. M. L. Perlman, G. T. Emery, BNL 13 921, 1969.
3. R. Daudel, Rev. Sci. (Paris) 85, 162, 1947.
4. E. Segré, Phys. Rev. 71, 274, 1947.
5. R. Bouchez, P. Daudel, R. Daudel, R. Muxart, J. Phys. Rad. 9, 336, 1948.
6. P. Benoist, Compt. Rend. 228, 309, 1949.
7. P. Benoist, R. Bouchez, P. Daudel, R. Daudel, A. Rogozinski, Phys. Rev. 76, 1000, 1949.
8. E. Segré, C. E. Wiegand, Phys. Rev. 75, 39, 1949, 81, 284, 1951.
9. R. Bouchez, P. Daudel, R. Daudel, R. Muxart, A. Rogozinski, J. Phys. Rad. 10, 201, 1949.
10. R. Bouchez et. al. J. Phys. Rad. 8, 336, 1947.
11. R. Bouchez, P. Daudel, R. Daudel, R. Muxart, C. R. 227, 525, 1948.
12. R. F. Leininger, E. Segré, C. E. Wiegand, Phys. Rev. 76, 897, 1949; 81, 280, 1951.
13. J. J. Kraushaar, E. D. Wilson, K. T. Bainbridge, Phys. Rev. 90, 610, 1953.
14. R. Bouchez, J. Tobailem, J. Robert, R. Muxart, R. Mellet, P. Daudel, R. Daudel, J. Phys. Rad. 17, 363, 1956.
15. H. W. Johlige, D. C. Aumann, N. J. Born, Phys. Rev. C. 2, 1616, 1970.
16. P. Huber, St. Gagneux, H. Leuenberger, Phys. Lett. 27B, 86, 1968.
17. St. Gagneux, P. Huber, H. Leuenberger, P. Nyikos Helv. Phys. Acta 43, 39, 1970.
18. R. Daudel J. Phys. Rad. 13, 557, 1962.
19. P. Kemény Rev Roum. Phys. 13, 901, 1968, preprint, IFA NS—21—1968, Proceedings of the Conference on the Elektron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 15—18, 1968, p. 432.
20. K. T. Bainbridge, M. Goldhaber and E. Wilson, Phys. Rev., 90, 430 1953.
21. J. C. Slater Phys. Rev. 84, 1261, 1951.
22. R. A. Porter, W. G. McMillan, Phys. Rev. 117, 795, 1960.
23. A. C. Malliaris, K. T. Bainbridge Phys. Rev. 149, 958, 1966.
24. J. A. Cooper, J. M. Hollander, J. O. Rasmussen Phys. Rev. Letters 15, 680, 1965.
25. W. Weirauch, W. D. Schmidt-Ott, F. Smend, A. Flammersfeld, (Zeit. für Phys. 209, 289, 1968.) mérései Zr fémiben nem igazolják [24]-et, míg Olin és Bainbridge mérései (idézte [2]-ben) igen.
26. A. Märelus, Ark. Fys. 37, 427, 1968.
27. P. Kemény Radiochem, Radioanal Lett. 2, 41, 1969. Kísérleti anyagot lásd a cikk 3. sz. hivatkozásánál.
28. S. Shimizu, H. Mazaki Phys. Rev. Lett. 17, 275, 1965.
29. H. Mazaki, S. Shimizu Phys. Lett. 23, 137, 1966.
30. H. Mazaki, S. Shimizu, Phys. Rev. 148, 1161, 1966.
31. M. Neve de Mevergnies, Phys. Lett. 26B, 615, 1968.
32. M. Neve de Mevergnies, Phys. Rev. Lett. 23, 422, 1969.
33. M. Neve de Mevergnies, Phys. Lett. 32B, 482, 1970.
34. M. Neve de Mevergnies, Meeting of the Nuclear Physics Division of the A. P. S. Houston—Texas 15—17 Oct. 1970.
35. D. H. Byers, R. Stump, Phys. Rev. 112, 77, 1958.
36. A. Olin, K. T. Bainbridge Phys. Rev. 179, 450, 1968.
37. K. T. Bainbridge, Chem. Eng. News. 30, 654, 1952.
38. P. G. Bergamini, G. Palmas, F. Piantelli, M. Rigato, Phys. Rev. Lett. 18, 468, 1967.
39. P. Kemény, Rev. Roum. Phys. 13, 485, 1968.
40. P. Kemény, Radiochem. Radioanal. Letters 2, 119, 1969.
41. P. M. Sherck, Phys. Rev. 75, 789, 1949.
42. J. R. Reitz, Phys. Rev. 77, 10, 1950.
43. B. S. Dzhelepov, L. I. Zyrianova, Vlianie elektricheskovo polia atoma na β raspad. Moscow, Izd. Akad. Nauk. USSR. 1956.

**ADATOK FIZIKAI, ILLETVE
FIZIKÁVAL KAPCSOLATOS
KUTATÁSOKKAL FOGLALKOZÓ HAZAI
INTÉZMÉNYEKRE VONATKOZÓAN**

A fizika számos más tudománnyal is szoros kapcsolatban van. Sok fizikus dolgozik nem kifejezetten fizikai, pl. matematikai, orvosi stb. kutatóhelyen. A MTA III. osztálya erre való tekintettel akkor, amikor több hazai és külföldi megkeresésre az alábbi anyagot összegyűjtötte, a teljesség kedvéért hozzávette a nem kifejezetten fizikai kutatásokkal foglalkozó azon intézmények adatait is, amelyek ismertetésükhöz hozzájárultak. Összeállította: Turchányi György.

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA INTÉZETEI

INSTITUTES OF THE HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES

AKUSZTIKAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Acoustic Research Group of the Hungarian Academy of Sciences

Address: Budapest VIII., Puskin u. 5—7.

Leader: Prof. Tamás *Tarnóczy*, D. Sc.

The Group is affiliated with the Institute of Wireless Telecommunication of the Budapest Technical University (director: Professor István Barta, member of the Hungarian Academy of Sciences). Main directions of the Group's research activities are: physical characteristics of sonic and ultrasonic wave propagation, speech analysis, synthesis and recognition, room acoustical measurements and normalization, equivalency between room acoustical data and subjective evaluation etc.

Date of founding: 1951.

ALKALOIDKÉMIAI TANSZÉKI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Alkaloid Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Gellért tér 4.

Director: Prof. Károly *Lempert*, D. Sc., corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

Main directions of the Institute's research activity include: synthesis of alkaloids and alkaloid-type compounds; synthesis and structure determination of naturally occurring flavonoids and other aglycones and glycosides; synthesis and investigation of reaction mechanisms of heterocyclic compounds of potential pharmacological and chemotherapeutic interest.

ANTIBIOTIKUM KÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Antibiotic Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Rezső *Bognár*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group is affiliated with Szerveskémi Intézet KLTE (Institute for Organic Chemistry of the Kossuth Lajos University of Debrecen).

ATOMMAG KUTATÓ INTÉZET MTA (ATOMKI)

Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Debrecen, Bem tér 18/c.

Director: Prof. Sándor *Szalay*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: L. *Medveczky*, C. Sc.

Investigations in low energy nuclear physics (nuclear reactions mainly with charged particles, studies in alpha, beta and gamma ray spectroscopy) constitute the main fields of research activity of the Institute.

A continuing project on the radioactive materials in nature and the application of nuclear methods to other sciences concerns the geochemistry of uranium, radioactivity in atmosphere, isotopic age determinations and stable isotopic geochemistry of certain elements.

Development work on nuclear instruments and methods (accelerators, ion-optics, nuclear electronics, detection techniques, corpuscular photography) also forms a part of the Institute's activities.

The accelerators of the Institute are: 300 kV neutron generator, 800 kV Cockroft-Walton generator, 1 MV Van de Graaff generator. There is also a 5 MV Van de Graaff generator under construction.

Date of founding, 1954.

Publications: ATOMKI Közlemények (ATOMKI Bulletin) (Communications of the Institute of Nuclear Research).

AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓ INTÉZET MTA

Research Institute for Automation of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Kende u. 13—17.

Director: Tibor Vámos, D. Sc.

Deputy Directors: Sándor Keresztély,
Pál Dely.

The main purpose of the Institute is to conduct basic research in the field of automatic control in Hungary and to reduce this work to practice on a nationwide scale. Areas of computers, special hardware and software development in particular for process control; problems of computer aided design; electronic devices (digital); pneumatic devices; power electronics.

Publications: MTA Automatizálási Kutató Intézet Közleményei (Reports of the Research Institute for Automation of the Hungarian Academy of Sciences).

Biológiai Kutató Intézet Tihany MTA

Biological Research Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Tihany.

Director: János Salánki, D. Sc.

Deputy Director: Imre Nagy, C. Sc.

In the Institute, scientific investigation is directed toward experimental neurobiology of invertebrates and hydrobiology. Particular areas of interest include: the central neural regulation of rhythmic and periodic activity, neural and humoral regulation of heart activity, structural and functional characteristics of "catch" muscles, distribution and role of active substances in the nervous system, neuromorphological, histochemical and electronmicroscopical investigations on the central nervous system of mollusks. Of equal merit are studies of the bottom fauna and flora in Lake Balaton and its population dynamics; circulation of organic materials (carbohydrates, lipids, and proteins) in fresh water; enzymatic activities in decomposition of proteins, and lipid metabolism in waterorganisms.

Publications: Annales Instituti Biologici (Tihany) Hung. Acad. Sci.

Botanikai Kutató Intézet MTA

Research Institute for Botany of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Vácátót.

Director: Prof. Bálint Zólyomi, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute conducts research in the areas of phytocenology and ecology. Research workers deal with the investigation of weeds, forest typology, meadow typology, problems of indicator plants, application of mathematical statistics in the field of phytocenology, experimental ecological investigation of the biological activity of soil, study of the primary production in the scope of the complex biocenological-bioclimatological research (IBP), the ecological circumstances of the production of alkaloids, and the like. Also the task is to maintain the Botanic Garden belonging to the Institute.

Csillagvizsgáló Intézet MTA

Astronomical Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XII., Konkoly Thege M. út 13—17.

Director: Prof. László Detre, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The primary research objectives of the Institute are stellar statistics and variable stars. A new observing station at Mount Mátra, equipped with a 60/90/180 cm Schmidt telescope and with

a Cassegrain reflector, was completed in 1965. Since 1966 the Observatory Baja (in Southern Hungary) belongs to the Institute.

The director of the Institute is active in the International Astronomical Union as President of Commission 27 on Variable Stars (1967—1970) and editor of the IAU publication "Information Bulletin on Variable Stars". The staff of the Institute consists of 13 scientists and 26 auxiliary personnel. Date of founding, 1899.

Publications: Az MTA Csillagvizsgáló Intézetének Közleményei (Communications of the Astronomical Observatory of the Hungarian Academy of Sciences. Monograph series). Information Bulletin on Variable Stars of Commission 27 of the IAU. Short articles for rapid publication.

DUNAKUTATÓ CSOPORT MTA

Station for Danube Research of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Göd, Jávorka Sándor út 14.

Director: Gábor Szemes, C. Sc.

The research work of the Station covers biological and ecological research of the Hungarian Danube, with special attention given to chemical, microbiological, zoological, botanical, ichthyological and saprobiological research of the river.

DUNÁNTÚLI TUDOMÁNYOS INTÉZET MTA

West Hungarian Research Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Pécs, Kulich utca 22.

Director: András Babics C. Sc.

Regional research is characteristic of the work of the Institute. Natural geography, geomorphology, hydrogeography, climatology, and economic, agricultural and population geography comprise the major portion of the investigative efforts. The Institute is really a complex one, where beside geography there are many-sided historical and ethnographical researches carried out.

ELEKTROKÉMIAI TANSZÉKI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Electrochemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Veszprém, Schönherz Zoltán u. 10.

Director: Prof. József Dévay, D. Sc.

Deputy director: Ferenc Ratkovics, C. Sc.

The Group is an affiliate of Fizikai Kémiai Tanszék (Veszprémi Vegyipari Egyetem). (Department of Physical Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.)

ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Theoretical Physics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest, XI., Budafoki út 8.

Director: Prof. A. Kónya, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group has particular interest in the many-body problem and in atomic and molecular structure. The staff is engaged in such research activities as the statistical theory of atoms and nuclei, miscellaneous problems of wave mechanics and their applications, investigations in quantum chemistry, the nonlinear theory of elementary particles, and electron structural research on multivalent metals and semiconductors. Date of founding, 1954.

ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉKI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Theoretical Physics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 5—7.

Director: Prof. Károly Nagy, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group is affiliated to Elméleti Fizikai tanszék ELTE (Department for Theoretical Physics of the Eötvös Loránd University).

FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓ INTÉZET MTA

Geographical Research Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VI., Népköztársaság u. 62.

Director: Márton *Pécsi*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: György *Enyedi*, C. Sc.

The Institute conducts research in economic and physical geography. It has a library of 50,000 volumes and maps. Founded in 1950, it was reorganized in 1952.

Publications: Földrajzi Értesítő (Geographical Bulletin).

Studies in Geography in Hungary. Földrajzi tanulmányok. (Geographical Studies.)

GÁZREAKCIÓKINETIKAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Gas Kinetics Research Group of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Szeged, Rerrich Béla tér 1. POB. 105.

Director: Prof. Ferenc *Márta*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group is affiliated with the Általános és Fizikai Kémiai Intézet JATE (Institute of General and Physical Chemistry of the József Attila University of Szeged).

GENETIKAI INTÉZET MTA

Institute of Genetics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest II., Herman Ottó út 15.

Director: Barna *Györfy*, D. Sc.

The research work of the Institute is carried in the directions of microbial genetics as well as population and evolutionary genetics of higher plants small rodents and moths.

Specific studies involve the mapping of phage and bacterial chromosomes by crossing, transformation, transduction and conjugation respectively. The regulation of DNA replication is studied in bacteria infected with phages or in lysogenic bacteria with particular regard to nucleotide sequences involved in DNA interactions. — The experimental approach to genetic variability in populations of higher plants is through biometric analysis of polygenic characters, identification of isoenzymes and regulation of organogenesis. Evolutionary genetic experiments are to analyse the roles of hybridization, polyploidy and mutation in the microevolution of plants. Experimental taxonomic work is carried out with natural populations of several plant groups. — Practical applications are the breeding of sweet corn and popcorn varieties as well as tobacco varieties with low nicotine content and blue-mold resistance. — In the scope of animal genetics the polymorphism is studied in natural populations of small rodents and moths. — Experiments with somatic cell cultures of both plants and animals were also started. Founded in 1942.

GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Geodetical and Geophysical Research Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Sopron, Múzeum utca 6. P. O. B. 9.

Director: Prof. Dr. h. c. mult. Dr. Antal *Tárczy-Hornoch*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Date of founding, 1971.

GEODÉZIAI KUTATÓ LABORATÓRIUM

Research Laboratory of Geodesy.

Research on advanced problems in geodesy includes the measuring and computation of corrections of bases for comparison, the corrections of levels, the tabulation of ellipsoidal computations, and the theory of errors and adjustments, scientific problems of mine surveying.

Other work involves the improvement of geodetic instruments and their accuracy. Research of methods for testing of instruments.

The measuring of latitude variations and related studies is done at the institute's astrogeodetic observatory, near Nagycenk. In the underground gravity observatory at Sopron-Kertváros research

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

is conducted on horizontal pendulum measurements and testing of gyrotheodolites. Research is made on the mathematical problems of satellite geodesy.

The Laboratory deals also with photogrammetry, specially with analytical and instrumental aerial triangulation and their problems.

Date of founding, 1955.

GEOFIZIKAI KUTATÓ LABORATÓRIUM

Research Laboratory of Geophysics.

Research in the Laboratory in Sopron are concentrated on problems of the electromagnetic field of the Earth, including geomagnetism and ionospheric research, as well as utilization of geomagnetic variations in the exploration of the Earth's interior (magnetotellurics). Different types of geomagnetic variations are studied especially temporal variations for the diagnostics of the magnetosphere. Special attention is paid to the micropulsations.

Investigations of spatial distribution of geomagnetic variations and of the connection between the elements of the Earth's electromagnetic field help to elucidate the deep structure of the Carpathian Basin in connection with the regional electric structure using different methods (magnetotellurics, geoelectric methods, earth currents).

In the field of atmospheric electricity the recording of the potential gradient is used to determine the global variations of it.

The measurement of the atmospheric radio noise at extremely low frequencies and that of the ionospheric absorption at long and middle waves enables the complex investigation of the regular and irregular variations in the lower ionosphere connected with changes of solar activity. The determination of the electron density profile from ionograms supplements the study of the structure of the ionosphere.

The Seismological Department of the Laboratory in Budapest deals with investigation of earthquakes from observations to interpretation regarding to the focal mechanism, propagation effects and physical parameters of the Earth. Special attention was paid to the surface waves (coda waves). The Department has 5 observatories (Budapest, Jósvalő, Kecskemét, Piskéstető, Sopron).

Date of founding, 1955.

The Institute is in connection with a great number of scientific institutions all over the world.

The scientific results are published in many scientific journals, especially in *Acta Geodaetica*, *Geophysica et Montanistica Academiae Scientiarum Hungaricae*.

Special publications: Geophysical Observatory Reports of the Geophysical Research Laboratory of the Hungarian Academy of Sciences, Observatory Nagycenk and Rapport Microsismique de l'Institut National Séismologique de Hongrie.

GEOKÉMIAI KUTATÓ LABORATÓRIUM MTA

Geochemical Research Laboratory of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: Prof. Dr. Elemér Szadeczky-Kardoss, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Research is done on various problems of geochemistry and petrology, particularly experimental investigations of migration of elements at high pressures and temperatures and research on organic components of sedimentary rocks. The Laboratory developed many new instruments, i.e. for high pressure measurements, a microreflectometer, etc. Date of founding, 1955.

IZOTÓP INTÉZET MTA

Institute of Isotopes of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest 114, POB. 77.

Director: Gábor Földiák D. Sc.

Deputy Director: Árpád Veres D. Sc.

Research at the Institute covers the following areas: separation of microcomponents in multi-component systems with the aid of ion exchange; investigation of the kinetics of different catalytic hydrocarbon reactions using digital computers for obtaining parameter estimates of the rate constants; modelling of complex heterogeneous catalytic reactions by computers; radiation chemistry

of hydrocarbons with special emphasis on the interactions between paraffinic and olefinic hydrocarbons in binary liquid mixtures during irradiation; syntheses of ^{14}C and ^3H labelled compounds with special interest on amino acids, peptides, purines, pyrimidines and steroid derivatives; photo-activation of nuclear isomers using large gamma sources and its application for activity measurements. Methods of analysis by means of radiochemical assay of soft beta-emitters and liquid scintillation counting are being developed. Applied research on the production of radioactive isotopes, radiation sources and isotope generators; on the measurement of radiation protection, radioactivity and nuclear spectroscopy; on irradiation using a 80 000 Ci ^{60}Co gamma-source; on process control and automation with nuclear instruments; on the use of tracer method in homogeneity and mixing investigations, as well as on radioactive waste disposal are also being carried out.

KÉMIAI SZERKEZETI KUTATÓ LABORATÓRIUM MTA

Centre for Studies on Chemical Structures of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 11/13.

Director: Prof. Sándor *Lengyel* D. Sc.

The Laboratory investigates the chemical structure of molecules, macromolecules, and other substances, making use of modern physical methods and instruments.

Recent papers show much interest in molecular structure studies by mass spectrometry and electron diffraction.

KÍSÉRLETI ORVOSTUDOMÁNYI KUTATÓ INTÉZET MTA

Institute of Experimental Medicine of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Szigony u. 43.

Director: Ervin *Stark*, D. Sc.

The Institute comprises the following Departments: Experimental Morphology, Pathophysiology, and Pharmacology. The Department for Experimental Morphology deals with problems of cell proliferation and differentiation, with emphasis on lymphopoiesis and haematopoiesis. The Pathophysiological Department studies neuroendocrinological problems, currently concentrating on investigations of the mechanisms controlling ACTH-secretion, and on the adrenal and extra-adrenal effects, and modes of action, of the hormone. A special unit within the Department is engaged in research on circulation, with emphasis on the role played by the lymphocirculation in the development of various pathological processes. The Department of Pharmacology is studying the mechanism of action of different parkinsonomimetics (oxotremorine, haloperidol, etc), amphetamines and the relationship between chemical structure and anticonvulsant activity. Date of foundation: 1952.

KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓINTÉZET MTA

Central Research Institute for Physics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest 114. POB. 49.

Director: Prof. Lénárd *Pál*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute conducts theoretical and experimental research on high energy physics and cosmic rays, nuclear physics, physical optics, solid state physics, nuclear chemistry, reactor physics and engineering, electronics.

In high energy physics the strong interaction of accelerated protons and pions, the decay of kaons and the production of resonances are investigated. In the field of cosmic ray research the modulation effects of the muon intensity are measured underground. — In the field of nuclear physics the characteristic properties of nuclei (ground and excited states, angular momenta, parity and magnetic moment etc.) and the mechanism of nuclear reactions are studied, by the use of a large variety of experimental techniques. — In the field of physical optics some problems of quantum electronics (e.g. non-linear optical effects and the collision and lifetime phenomena of excited atomic states) are investigated. The various CW- and Q-switched lasers serve for some practical applications, too.¹ — The research in the field of solid state physics is connected with the problems of magnetic structures and magnetic phase transformations as well as with the magnetic properties of dilute alloys. Nuclear, neutron physical and resonance techniques are used. — The research activities in the laboratories for nuclear chemistry cover basic problems in chemistry of

stable and radioactive isotopes, radiation chemistry, nuclear analytical chemistry, chemistry of rare elements and compounds. — The Institute has a 5 MW water cooled and moderated research reactor with 10 horizontal experimental channels, mainly utilized for research. The other main purpose of the reactor is the production of radio isotopes. The main instrumental basis of the experimental reactor physics is constituted by zero reactors. — The activity in electronics is concentrated on data acquisition systems, computers and computer techniques. Date of foundation: 1950.

Publications: Reports of the Central Research Institute for Physics.

KÖZPONTI KÉMIAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Science.

Address: Budapest II., Pusztaszeri út 57/69.

Director: Ferenc Nagy, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: László Ötvös, D. Sc.

The Institute's research activity is organized under five main sections: Molecular Structures-Catalysis, Polymerization Kinetics, Free Radical Kinetics and Organic Reaction Mechanism research.

The section of Molecular Structures is concerned with optical (IR and RAMAN), and radio-frequency (NMR, EPR) spectroscopy and X-ray diffraction studies. The section of Catalysis is engaged in adsorption and gas chromatography, semiconductor catalysis, and catalytic hydrogenation. The Polymerization Kinetics section is concerned with kinetics of radical polymerization, polymer degradation, and solid state polymerization, EPR spectroscopy of stable free radicals and quantum chemistry of macromolecules, including biopolymers. The section of Free Radical Kinetics is engaged in liquid phase radical reactions (oxydation, radiolysis). The section of Organic Reaction Mechanism is concerned with mechanism of selected organic reactions, stereochemistry, synthesis and analysis of labelled compounds, and physical organic chemistry.

Research is mainly fundamental, but in certain cases industry directed.

KRISTÁLYFIZIKAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Crystal Physics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 9.

Director: Prof. Imre Tarján, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

This Research Group is affiliated to Semmelweis OTE Biofizikai Intézet (Institute of Biophysics of the Semmelweis Medical University of Budapest).

KRISTÁLYNÖVEKEDÉSI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Crystal Growth of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Budafoki út 8.

Head: József Kiss, C. Sc.

The main branches of research in the Group are the nucleation of crystals, crystal growth in ionic crystals.

This Research Group is affiliated to Kísérleti Fizikai Intézet BME (Institute of Experimental Physics, Technical University of Budapest).

KVANTITATIV ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Academy Research Group for Quantitative Analytical Chemistry.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/b.

Director: Prof. Z. G. Szabó, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The research of the Group are chemical analysis, as well as further development of the chemical and physical methods of analysis, primarily in the field of analysis of substances present in trace amounts.

This Research Group was founded under the leadership of Professor Elemér Schulek. After his decease Prof. Zoltán G. Szabó, succeeded as Head of the Group and the research was extended to the field of solid state reactions, too.

LUMINESZCENCIA ÉS FÉLVEZETŐ TANSZÉKI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Luminescence and Semiconductors of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Szeged, Dóm tér 9.

Director: Prof. István *Ketskemény*, D. Sc.

The Group is affiliated to Kísérleti Fizikai Intézet JATE (Institute of Experimental Physics of the Attila József University, Szeged).

MATEMATIKAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest V., Reáltanoda u. 13—15.

Director: Prof. László *Fejes Tóth*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute carries on research work in pure as well as in applied mathematics. Investigations are being carried out on: probability theory information theory, mathematical statistics, the theory of orthogonal series, approximation theory, differential equations, functional analysis, theory of functions of a complex variable, topology, graph theory, algebra, number theory, discrete geometry, differential geometry, numerical analysis, mathematical logics, theory of sets and mathematical theory of machines. Date of foundation: 1950.

The Institute performs the duties of editing the *Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica*, journal of the Hungarian Academy of Sciences.

MEZŐGAZDASÁGI KUTATÓ INTÉZET MTA

Agricultural Research Institute of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Martonvásár.

Director: Sándor *Rajki*, D. Sc.

Basic research at the Institute relates to problems of maize physiology, the biochemistry of the vernalization process, the genetics of autumnization, the comparative study of generative and vegetative hybrids including hybrid wheat and wheat aneuploidy genetics, and *Triticum* remote hybrids and mutants. Applied research is concerned with the breeding and cultivation of maize, wheat and barley and with the chemization of land tillage. Date of founding: 1949.

MIKROBIOLÓGIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Mikrobiological Research Group of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XII., Pihenő út 1.

Director: Prof. Gyula *Weiszfeiler*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group's main fields of research are microbial genetics, mycobacteria, mechanism of immunity, oncogenic viruses, interferon food microbiology and algae.

MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Industrial Chemical Analysis, Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Gellért tér 4.

Director: Prof. E. *Pungor*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group deals with problems connected mainly with industrial analysis, although these may be related to basic theoretical research. In the field of thermoanalytical research, the Group has developed a new instrument called a derivatograph, by the use of which bauxites, coals, drugs and chemicals can be examined rapidly. Works are in progress in the field of emission and absorption spectrographic analysis, organic microanalysis, radiochemistry and gas chromatography. Recently research also in the field of electroanalytical chemistry is going on, mainly in connection with the development and application of membrane electrodes. In the past 15 years, 24 books and more than 500 papers were written in which results of these works are published.

MŰSZAKI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Research Institute for Technical Physics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest IV., Újpest, Főti út 56.

Director: György *Szigeti*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: Iván *Szép*, C. Sc.

The Institute is engaged chiefly in basic research in the field of solid state physics, mainly semi-conductors, luminescent materials, and refractory metals, particularly tungsten.

Foundation date: 1958.

MŰSZAKI KÉMIAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Research Institute for Technical Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Veszprém, Schönherz Zoltán u. 10.

Budapest XI., Budafoki út 47.

Director: Károly *Polinszky*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: Prof. Tibor *Blickle*, D. Sc.

The basic field of research of the Institute is the area of process engineering. Work is being done on the development of the methodology and the basic laws of unit operations and unit processes. The Institute has the special function of collecting and evaluating the experiences of the nation's industries in an effort to promote progress in the industrial technology of Hungary.

The more important research results of the Institute include: application of the continuous fluidization process to formerly intermittent chemical processes, such as production of dye pigments, pyrite burning; adaptation of the process of foam-column technologies, e.g., gas adsorption and elutration in a single operation, development of new hypersorbents; development of new types of atomizers; development of intensive processes, e.g. rotation film, spouted bed; mechanochemistry, granulation; crystallization; optimization in process engineering; mathematical modelling of transport processes; some new industrial methods of measurements, e.g., a new and rapid way for the determination of heats of combustion; and application of the graph theory to chemical industrial systems.

Date of founding: 1960.

NAPFIZIKAI OBSZERVATÓRIUM MTA

Heliophysical Observatory of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Loránt *Dezső*, D. Sc.

The major activity of the Observatory consists of various investigations of sunspots. In the course of the analyses of the development of sunspot groups, several photographs are taken of the complete solar disk, each day, whenever possible.

NÖVÉNYÉLETTANI INTÉZET MTA

Institute of Plant Physiology of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Szeged, P. O. B. 521

Director: Dr. Gábor *Farkas*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute is concerned with plant physiology, with special emphasis on the study of leaf metabolism. Investigations are carried out on the regulation and alteration of metabolism under the effect of virus infection.

OLAJBÁNYÁSZATI KUTATÓ LABORATÓRIUM MTA

Petroleum Engineering Research Laboratory of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Director: József *Tóth*, D. Sc.

Research projects at the Laboratory include work on surface and interfacial phenomena in the production of oil and studies of the mechanism of displacement of oil from porous materials.

Publications: Magyar Tudományos Akadémia Olajbányászati Kutató Laboratóriuma Kiadványai (Proceeding of the Petroleum Engineering Research Laboratory of the Hungarian Academy of Sciences).

ORVOSRADIOLÓGIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Medical Radiology of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Üllői út 78.

Director: Prof. Zoltán Zsebők, D. Sc.

The Group studies the immediate effect of X-irradiation on DNA synthesis, and mitotic activity in microorganisms. Further investigations of enzyme inactivation by radiation are in progress. In the radiobiological department, experiments are carried out on rats with the purpose of studying chemical protection against lethal X-radiation. Investigations are also under way to study the changes of intestinal absorption during acute radiation syndrome. The radiophysical section of the Group is engaged in studying photothermoluminescent dosimetry.

PEPTIDKÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Peptide Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/b.

Director: Prof. Győző (Victor) Bruckner, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group is affiliated with the Szerves Kémiai Intézet ELTE (Institute for Organic Chemistry of the Eötvös Loránd University).

REAKCIÓKINETIKAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Solution Reaction Kinetics of the Hungarian Academy of Sciences.

Attila József University.

Address: Szeged, Dóm tér 7. P. O. Box 440.

Director: Prof. László J. Csányi, D. Sc.

In the Group the research is concerned with investigation of reaction kinetics in gas and liquid phase paying special attention to catalytic phenomena. The thoroughly followed lines are: kinetics of thermal decomposition of C_2-C_4 hydrocarbons initiated by alkyl- and alkoxy radicals; kinetics of induced and oxidation-reduction reactions involving HO_2 , OH , SO_4^- , $As(IV)$, $Cr(IV)$, $Cr(V)$ radicals; equilibrium and kinetical study of formation of complexes, and some analytical researches based on complex formation and catalysis.

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI KÖZPONT MTA

Computing Centre of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest I., Úri u. 49.

Director: Tibor Vámos, D. Sc.

Activities of the Centre imply research work and development in the field of computer sciences and applied mathematics. The Centre is responsible for the solution of mathematical problems arising in the course of the work of scientific research institutes, particularly those of the Academy of Sciences. It also contributes to the solution of scientific problems, in case of need, arising in industry and economy. Date of founding 1956.

Publications: MTA Számítástechnikai Központ Közlemények (Communications of the Computing Centre of the Hungarian Academy of Sciences).

SZEGEDI BIOLÓGIA KÖZPONT BIOKÉMIAI INTÉZETE ENZIMOLÓGIAI RÉSZLEGE MTA

Institute of Biochemistry, Departement of Enzymology, Biological Research Center, Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Karolina út 29.

Director: F. Brunó Straub, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Deputy Director: Gertrud Szabolcsi, D. Sc.

The Institute is engaged in intensive research on the relationship between the chemical structure and the biological function of proteins and enzymes. Research efforts are presently concerned with the study of several dehydrogenases, hydrolases and aldolase, by the method of specific chemical modification, kinetic studies, optical methods and amino acid sequence determination of physical methods UV and IR spectrophotometry, optical rotatory dispersion and small angle X-ray diffraction are utilized.

SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Technology of Organic Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest XI., Műgyetem rakpart 3.

Director: Prof. Dr. Zoltán Csűrös, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Preparation and development of heterogeneous catalysts. Investigation of metal catalysts in liquid and gas phase by means of electrochemical, magnetic and thermodesorption methods.

An other part of the investigations deals with the reaction of phosgene with compounds containing activated hydrogen and the possibilities of an industrial scale production of aromatic isocyanates.

In the field of textile chemistry, the formation of covalent bonds between the dye and cellulose is investigated in homogeneous and heterogeneous reactions. Beyond this, the chemical modification of natural and synthetic fibrous materials has a particular interest for the group.

SZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Inorganic Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: Prof. Béla Lengyel, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Scientific studies have dealt with the investigation of structural inorganic chemistry with special regard to inorganic molecule structure and inorganic polymer structure in silicon chemistry.

SZILÁRDSÁGTANI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group on Statics of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest V., Vigadó tér 1.

Director: Prof. Pál Csonka, D. Sc.

Research covers static aspects of problems of building construction, especially shell structures.

SZTEREOKÉMIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Stereochemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest X., Gém u. 3.

Director: László Ötvös, C. Sc.

The Group is concerned with basic research in the stereochemistry of carbon compounds and the stereospecific synthesis of hyoscyne, (scopolamine), the elucidation of the absolute configuration of tropic acid and valeroidine being its most recent achievements.

The Group's director has published more than 180 papers on organic chemistry, covering the field of syntheses and structure of isoquinoline, ephedrine, tropans, and pyrrolizidine alkaloids; as well as in the geometry of sphingosine and in conformational analysis.

In 1960 he published a two-volume textbook on organic chemistry which was translated from Hungarian into German, English, and Russian.

TALAJMIKROBIOLÓGIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Soil Microbiology of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Sopron, Bajcsy-Zsilinszky út 4.

Director: Prof. György Pántos, C. Sc.

The work of the Group comprises research on living microorganisms in the rhizosphere of wooded plants and on microorganisms in symbiosis with the root of wooded plants. The scientific

research work principally comprises studies on biological properties of the rhizosphere bacteria, of actinomyces, and of mykorrhizic fungi. The reciprocity between microorganisms and higher wooded plants is an area of interest.

TALAJTANI ÉS AGROKÉMIAI KUTATÓ INTÉZET MTA

Research Institute of Soil Science and Agricultural Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest II., Herman O. u. 15.

Director: István Szabolcs, D. Sc.

The principal areas of research of the Institute currently are soil genetics, soil physics, soil chemistry, soil analysis, soil fertility, reclamation of saline, alkali, and acid soils and soil conservation, effects of organic and mineral fertilizers, mineral nutrition of plants, and soil microbiology.

The activities of the Institute cover a great deal of theoretical and laboratory work, and also field experimentation in many parts of the country.

There is a close connection between fundamental and applied research and between the work devoted to the development of new technics. The Institute has isotope laboratories, mass spectrometer, X-ray, DTA, electron microscope laboratories, etc. New laboratory methods are continuously being developed.

It has a library of over 18,000 volumes. Date of founding 1949.

TALAJZOOLOGIAI KUTATÓ CSOPORT MTA

Research Group for Soil Zoology of the Hungarian Academy of Sciences.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 3.

Director: Prof. Dr. János Balogh, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Group's program has been directed in general toward ecology, cenology, production biology, hydrobiology and systematic investigation. Research is directed toward the important species in Hungary as well as in European countries, with special regard to soil animals of tropical countries.

EGYETEMEK UNIVERSITIES

TUDOMÁNYEGYETEMEK

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM, BUDAPEST

ALKALMAZOTT NÖVÉNYTANI ÉS SZÖVETFEJLŐDÉSTANI TANSZÉK ELTE

Institute for Applied Botany and Histogenetics of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: Prof. Sándor *Sárkány*, D. Sc.

The Institute is engaged in plant cytology, investigations on cell protoplast and structure of cell wall, cell differentiation, histogenetics of vegetative and reproductive organs in connection with function; and investigations on charcoal of quaternary age. Research of ontogeny and productivity of medicinal plants in connection with the alkaloid or volatile oil content is a part of its activity.

Publications: Annales Universitatis Scientiarum Budapestiensis de Rolando Eötvös nominatae. (Sectio Biologica).

ALSÓGÖDI BIOLÓGIAI ÁLLOMÁS ELTE

Experimental Station of the Eötvös Loránd University of Budapest.

Address: Alsógöd, Jávorka Sándor út 16.

Director: Prof. Mihály *Maróti*, D. Sc.

Two kinds of research are going on at the Station. The members of the Biological Department of the Eötvös Loránd University are engaged in electron microscopic research on the morphology of plant cells, on pharmaceutical botany, on the regulation of pathways in plant metabolism, and on plant genetics. Research workers of the Hungarian Academy of Sciences investigating the hydrobiology of the Danube form a part of the research effort going on at the Station.

ANALÍZIS I. TANSZÉK ELTE

The First Department of Analysis of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: Prof. Ákos *Császár*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Department conducts research in mathematical analysis, theory of sets, mathematical logic, and general topology.

Publication: Annales Universitatis Scientiarum Budapestiensis de Rolando Eötvös nominatae (Sectio Mathematica). The annual is the joint publication of the mathematical institutes.

ANALÍZIS II. TANSZÉK ELTE

The Second Department of Analysis of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: Prof. András *Kósa*, C. Sc.

The Department is concerned with calculus of variation, theory of differential equations, functional analysis, and theory of orthogonal series.

Publications: Annales Universitatis Scientiarum Budapestiensis de Rolando Eötvös nominatae (Sectio Mathematica). The annual is the joint publication of the mathematical institutes.

ATOMFIZIKAI TANSZÉK ELTE

Department of Atomic Physics of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 5—7.

Director: Prof. György Marx, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences

Deputy Director: Prof. Lajos Jánossy, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Beside teaching theoretical and applied atomic physics the Department conducts research in different fields:

In high energy physics the strong and weak interactions of the elementary particles are investigated, both theoretically (algebraic and analytical approach) and experimentally.

The Mössbauer effect group investigates different chemical problems with the help of the Mössbauer effect.

In the neutron laboratory research in fast neutron spectroscopy is performed with 14 MeV neutrons, produced in the 0,2 MeV neutron generator.

ÁBRÁZOLÓ ÉS PROJEKTÍVGEOMETRIAI TANSZÉK ELTE

Department of Descriptive and Projective Geometry of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: Prof. Ferenc Kárteszi, D. Sc.

The Department is working on algebraic geometry, particularly finite spaces and discrete geometry.

Publication: Annales Universitatis Scientiarum Budapestiensis de Rolando Eötvös nominatae (Sectio Mathematica). The annual is the joint publication of the mathematical institutes.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karának Szakmódszertani Közleményei.

ÁLLATRENDSZERTANI TANSZÉK ELTE

Institute for Systematic Zoology of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 3.

Director: Prof. János Balogh, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute's research is concerned with soil zoology and covers systematic studies on Rotatoria, Nematoda, Oligochaeta, Amphipoda, Diplopoda, Chilopoda, Collembola, Araneidea, Acarina. Animal ecology and biospeleology investigations are a part of their activities.

Publications: Opuscula Zoologica Instituti Zoosystematici Universitatis Budapestiensis (E, G).

ÁLTALÁNOS ÁLLATTANI ÉS ÖSSZEHASONLÍTÓ BONCTANI INTÉZET ELTE

Department of General Zoology and Comparative Anatomy of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 3.

Director: János Kovács, C. Sc.

Research work covers the investigations of cytological problems, (autophagy, morphology and formation of lysosomes) and comparative study of endocrine system (especially adrenal glands) of lower vertebrates.

ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK ELTE

Department of Theoretical Physics of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 5—7.

Director: Prof. Károly Nagy, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute conducts basic research in the fields of classical and quantum physics and astrophysics. Interests of the Institute include: relativity, quantum electrodynamics, theories of elementary particles, axiomatic thermodynamics, the quantum mechanical many-body problem, plazma physics, magnetohydrodynamics, and theoretical nuclear physics.

The Institute has been credited with achieving important results in the theoretical analysis of the problems of electrodynamics in moving dielectrics, the interpretation of quantum mechanics, and the basic formulation of relativistic dynamics. Members of the Institute have received awards for work in these fields and those of elementary particles and plasma physics.

Elméleti Fizikai Tanszéki Kutató Csoport MTA (Academy Research Group for Theoretical Physics) is affiliated with this Institute.

FIZIKAI KÉMIAI ÉS RADIOLÓGIAI TANSZÉK ELTE

Department of Physical Chemistry and Radiology of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 11/13.

Director: László Kiss, D. Sc.

Fundamental research in the Department is being carried out in two fields of electrochemistry, specifically the mechanism of electrode processes and the structure and transport processes in electrolyte solutions. Over 100 papers describing research results have been published in the last decade. The subjects covered such areas as the effect of direct current electrode processes, the kinetics of anodic dissolution of some metals, conductance, viscosity, transference numbers, in aqueous electrolyte solutions, and electrolytes dissolved in mixtures of water and other polar liquids.

KOLLOIDKÉMIAI ÉS KOLLOIDTECHNOLÓGIAI TANSZÉK ELTE

Department of Colloid Science of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 11—13.

Director: Prof. Ervin Wolfram, D. Sc.

Research work at the Department is concerned with colloid chemistry, surface chemistry, and physical chemistry of macromolecules.

METEOROLÓGIAI TANSZÉK ELTE

Meteorological Department of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: Prof. Frigyes Dési, D. Sc.

Research is concerned with meteorology, climatology and agrometeorology. Published papers deal with weather forecasting, the influence of orography on synoptic processes, statistical structure of meteorological fields, radiation problems, and methods of heat and the water balance of the atmosphere and the surface of the earth.

MICROBIOLÓGIAI TANSZÉK ELTE

Department of Microbiology of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: József Bánhegyi, C. Sc.

For several years the Institute has been engaged in a thorough study of the taxonomy of the lower fungi, with the aim of compiling a key, which will be published in Hungarian and German.

Research on petroleum microbiology is directed toward the use of bacteria in prospecting for oil and gas and for releasing petroleum from exhausted wells.

In addition, the staff of the Institute is occupied with studies on fungal diseases of insects.

NÖVÉNYÉLETTANI INTÉZET ELTE

Department of Plant Physiology of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest, VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: Prof. Vilmos Frenyó, D. Sc.

The Department is engaged in research on plants, particularly with regard to their mineral nutrition. The main sphere of activity encompasses studies on the comparative physiological characteristics of isolated plant tissues, organs, and cell cultures. A few enzymes (dehydrogenases, amylase,

and catalase) and nutrient requirements of different crops are also under investigation. The Department has well-equipped tissue culture and isotope laboratories, and a vegetation house.

A research group organized by the biology section of the Hungarian Academy of Sciences deals primarily with the physiology of plant diseases and with the regulation of enzyme activity.

NÖVÉNYRENDSZERTANI ÉS NÖVÉNYFÖLDRAJZI TANSZÉK ELTE

Department for Plant Taxonomy and Ecology of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: Tibor *Simon*, D. Sc.

Ecology and the taxonomy of lower and higher plants are the main concern of the Institute. Various phytocoenoses in Hungary, including forest vegetation; and meadow, rock and cultivated plants are being studied and mapped. Quarter palynology and experimental ecology are other areas of interest.

SZÁRMAZÁS- ÉS ÖRÖKLÉSTANI INTÉZET ELTE

Department of Genetics and Phylogenetics of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest, VIII., Múzeum krt. 4/a.

Director: Prof. Béla *Faludi*, D. Sc.

At the Institute current research in molecular biology is concerned with cell regulation in normal and tumorous tissue cultures of plants, which is being studied on the basis of cell metabolism. Transport processes and genetic controls appearing on the surface of the cell are also under investigation.

Other work has been concerned with the pigments in normal and albino corn leaves, covering kinetic investigation of the photodestruction of the pigments, and the characteristics of pigment — protein complexes in normal and chloroplast mutant leaves and their role in the photosynthesis. The biochemistry of muscular contraction is being studied by the Biochemical Group of the Department.

SZERVES KÉMIAI INTÉZET ELTE

Institute of Organic Chemistry of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/b.

Director: Árpád *Kucsman*, D. Sc.

The Institute is engaged in research on natural and other organic compounds, particularly on polypeptides, glycoproteins, on condensation products of natural phenols and their ethers, and also on special types of organic sulfur compounds.

Peptidkémiai Kutató Csoport MTA (Academy Research Group for Peptide Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences) is affiliated with this Institute.

SZERVETLEN ÉS ANALITIKAI KÉMIAI INTÉZET ELTE

Institute of Inorganic and Analytical Chemistry of the Eötvös Loránd University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 4/b.

Director: Prof. Zoltán G. *Szabó*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute deals with the following topics: In physical chemistry: chemical processes proceeding both in and on solid phases; the kinetics and mechanism of halogen exchange and halogenation reactions.

In inorganic chemistry: equilibrium studies of transition metal complexes and Mössbauer spectroscopy of iron complexes.

In analytical chemistry: the study of the processes of classical volumetric and gravimetric methods and their applicability using organic, as well as inorganic compounds.

In instrumental analysis: investigations are in progress in the field of polarography and emission and absorption spectroscopy, the applicability of isotopes for analytical purposes is also studied.

SZILÁRDTESTFIZIKA TANSZÉK ELTE

Department of Solid State Physics of Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6/8.

Director: Prof. Elemér Nagy, D. Sc.

The Institute is conducting research on phase transformations. Equilibrium studies deal with the singularities during second order transformations, while for first-order transformations the kinetics are investigated. The substances investigated are mainly practically important precipitating aluminium or copper base alloys. The experimental methods include high sensitivity calorimetry, dilatometry, measurement of electrical and magnetic properties, various X-ray techniques, etc.

VALÓSZÍNŰÉGSZÁMÍTÁSI TANSZÉK ELTE

Department of Probability Theory of the Eötvös Loránd University.

Address: Budapest VIII., Múzeum krt. 6—8.

Director: J. Mogyoródi, C. Sc.

Areas of research at the Department cover probability theory and its applications, mathematical statistics, information theory, and operations research.

Publication: Annales Universitatis Scientiarum Budapestinensis de Rolando Eötvös nominatae (Sectio Mathematica). The annual is the joint publication of the mathematical departments.

JÓZSEF ATTILA TUDOMÁNYEGYETEM, SZEGED

ALKALMAZOTT KÉMIAI INTÉZET JATE

Institute of Applied Chemistry of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Béke épület II.

Director: György Sipos, assoc. prof., C. Sc.

Deputy Director: Tamás Széll, assoc. prof., C. Sc.

The Institute deals mainly with organic chemistry, with special attention given to organic reactions, mechanisms, and kinetics. In connection with the study of some reactions, new compounds are being synthesized. These new compounds are being screened biologically. Some active chalcones and bioflavones have been found. Another research branch of the Institute is dealing with new developments in chemical engineering, with special attention given to producing reactive metal powders, and to developing reactors of new type.

ÁLLATÉLETTANI TANSZÉK JATE

Institute of Animal Physiology of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Táncsics Mihály u. 2.

Director: Ottó Fehér, assistant professor, D. Sc.

Beyond its teaching and educational functions on undergraduate and postgraduate levels the Institute is active in neurophysiological research. The main fields of interest are: the mechanism of origin of the cortical evoked and seizure potentials and spreading depression; biochemical changes in the central nervous system underlying the fixation of memory traces, the role of the system underlying the interneuronal transmission of impulses, the action of ions on the molluscan heart.

ÁLLATTANI INTÉZET JATE

Zoological Institute of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Táncsics Mihály u. 2.

Director: Dr. L. Móczár, D. Sc.

The Institute carries out investigations in the following special fields of interest: systematics, ecology, protistology and neuromorphology. From taxonomical point of view the Institute elaborates certain families of Hymenoptera found in the Carpathian Basin, and extends its survey, in some cases, even to world material, producing monographs on individual Hymenoptera species with the main stress on ecology and ethology. Besides the current comparative work between recent and Pleistocene molluscs, their coenological principles and relations to zooplanktonic hydrographic conditions are the basic trend of investigations. Ample work is expended on the invertebrate fauna of River Tisza as well as the microorganisms of rhizospheres. The morphogenesis of the microstructures of protozoa is studied together with sensitized, photoinduced motility reactions and their structural and metabolic bases. Finally, it should be mentioned that light and electron microscopic comparative neurohistological and histochemical researches are being carried out on different animal organisms, primarily on the cardiovascular system and on the central nervous system of insects.

ÁLTALÁNOS ÉS FIZIKAI KÉMIAI INTÉZET JATE

Institute of General and Physical Chemistry of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Director: Prof. Ferenc Márta, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute investigates reaction kinetics, such as the effect of various catalysts and inhibitors on the thermal decomposition reactions of hydrocarbons, as well as on the decomposition of solids.

Other research concerns the mechanism of corrosion processes in gases and in industrially useful protective treatments against corrosion. Still another field of interest is the structural investigation of complex compounds, using spectroscopic, polarographic, magnetic, and dipole moment methods of measurement.

ÁSVÁNYTANI, GEOKÉMIAI ÉS KÖZETTANI INTÉZET JATE

Institute of Mineralogy, Geochemistry and Petrography of the József Attila University of Szeged.

Address: Táncsics Mihály u. 2. Szeged.

Director: Prof. Gyula Grasselly, D. Sc.

The specific investigations are as follows: mineralogical and geochemical research on natural and artificial manganese oxides with regard to their thermal stability and their dissolution, oxidation and transformation in aqueous solutions as well as the relationship between their condition of formation and composition and the adsorption properties of manganese compounds; geochemical investigation of sediments rich in organic materials; studies on the electrochemical behaviour of sulfide ores pertaining to the weathering of sulfide ore deposits; petrographic investigations of metamagmatites in the Mátra Mountains.

Researches during the last twenty years on mineral occurrences in Hungary resulted in the recent compilation of a monograph on Hungarian minerals.

Publications: Acta Mineralogica—Petrographica.

BOLYAI JÁNOS INTÉZET JATE

Bolyai Institute of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Director: Prof. Béla Szökefalvi-Nagy, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Bolyai Institute, primarily concerned with mathematics, reports that investigations have been conducted in functional analysis in the theory of differential equations, orthogonal series, and Fourier series. Work continues on the theory of algebraic systems. In the area of differential geometry, significant results are reported.

Theoretical investigations include problems in mathematical logic, in the theory of automata, and transfinite functions within investigations on the theory of sets. The Bolyai Institute publishes the mathematical journal: Acta Scientiarum Mathematicarum, founded in 1922 and presently (1969) in its 30 volume.

ELMÉLETI FIZIKAI INTÉZET JATE

Institute of Theoretical Physics of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Director: Ferenc Gilde, C. Sc.

Research at the institute is concerned with the theory of relativity, of many-body systems. The other field of interest is quantum chemistry. These investigations cover the theory of the hydrogen molecule, its excited states, the problem of hybridization, the configuration interaction and the electronic structure of complex molecules.

EMBERTANI INTÉZET JATE

Institute of Anthropology of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Táncsics Mihály u. 2.

Director: Prof. Pál Lipták, D. Sc.

The main concern of the Institute is historical anthropology (paleoanthropology). There is also interest in the Hungarian and Eurasiatic steppe belt; ethnical anthropology (anthropology of recent population) in Hungary, human growth and chemical analysis of bones.

KIBERNETIKAI LABORATÓRIUM JATE

Cybernetical Laboratory of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Director: Prof. László *Kalmár*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Technological Director: Dániel *Muszka*, Ph. D.

Besides cooperation with the Bolyai Institute, Department of Foundations of Mathematics and Computer Science, of the same University in the education of future program designer mathematicians (system analysts) and running of a computer (Minsk-22) used mainly for education of the students mentioned above and helping the educational and research work of the other departments of the University, the laboratory is doing computational work for the industry as well, the research work of the Laboratory is mainly concerned with investigations in Computer Science (software development methods, compilers etc.) as well as in mathematical, computational and technological modelling of real processes (biological, linguistical, economical ones). Also research work in traffic cybernetics (automation of automobil driving, measuring the causes of the tiring effect of driving etc.) and in development of peripherals of digital computers (visual input unit, analogical unit for hybridization etc.) is conducted.

KÍSÉRLETI FIZIKAI INTÉZET JATE

Institute of Experimental Physics of the Attila József University of Szeged.

Address: Szeged, Dóm tér 9.

Director: Prof. István *Ketskeméty*, D. Sc.

The main scientific work of the Institute is performed within the framework of a Research Group (see below), affiliated with this Institute. The continuing research program of the Group embraces the characteristics of molecular fluorescence and energy exchange processes in fluorescent solutions. The investigations are also extended to systems of biological interest. The analysis of surface properties of germanium and silicon and the electric properties of selenium have been part of the Group's program for several years. The Institute also has a research program dealing with the didactics of physics.

The Research Group for Luminescence and Semiconductors of the Hungarian Academy of Sciences (MTA Lumineszcencia és Félvezető Tanszéki Kutató Csoport) is affiliated with this Institute.

KOLLOIDKÉMIAI TANSZÉK JATE

Institute for Colloid Chemistry of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Director: Assoc. Prof. Ferenc *Szántó*, C. Sc.

The chief studies of the Institute concern sedimentation, sediment structure, and rheological properties of suspensions in organic media. The colloid-chemical and rheological properties of clay mineral sols and suspensions are also being investigated.

NÖVÉNYÉLETTANI INTÉZET JATE

Institute for Plant Physiology of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged 428.

Director: Prof. István *Szalai*, D. Sc.

Investigation by the Institute of the physiology of plant diseases has made a name for Hungary in this field of science. The director has published many papers on the physiology of potato plants, covering all phases of the subject. Recently: physiology of the seeds dormancy.

Naturally occurring growth-promoting and growth-inhibiting substances have been examined with special attention to their interaction in the process of germination and development.

Microbiological research is directed toward antimicrobial compounds produced by higher plants. Some new antibiotics which are active against plant bacteria and fungi have been isolated.

In addition, synthetic inhibitors are being tested for their effect on fungi. The Institute is under the direction of the Ministry of Education and of the Academy.

NÖVÉNYTANI TANSZÉK JATE

Department of Botany of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Tácsics M. u. 2.

Director: Prof. Imre *Horváth*, D. Sc.

The Department carries out scientific research work in three lines:

Within the scope of auto-ecological and synecological studies, the utilization of radiating solar energy is studied on the basis of investigations made under controlled and natural circumstances. The effect of the spectral composition of light is studied first of all. These studies are co-ordinated with the International Biological Program and with COMECON co-operation.

In the course of research of flora and vegetation history, palynological studies are carried out on tertiary and quaternary sediments. Spatial and temporal differentiations of various taxons are made with a view to paleo-ecological, paleo-climatological and stratigraphical conclusions.

Within the subject of "The molecular-biological fundaments of plant growth and development" the question is studied first of all, what is the significance of optical purity in the organization and in evolution.

SZERVES KÉMIAI INTÉZET JATE

Institute of Organic Chemistry of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Dóm tér 8.

Director: Prof. Kálmán *Kovács*, D. Sc.

The Institute's research has been concentrated on the synthesis of biologically active peptides and polypeptides. Another area of interests is the chemical and stereochemical investigation of modified steroids as well as tropane derivatives. Further research fields of the Institute are the cyclic and acyclic amino alcohols, the petroleum chemistry and the organic catalysis.

RADIOKÉMIAI TANSZÉK JATE

Institute for Radiochemistry of the József Attila University of Szeged.

Address: Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Director: Doc. Ferenc *Sirokmán*, C. Sc.

The Institute's research covers the application of radioactive isotopes in investigations of the mechanisms of hydrocarbon oxidation. Investigations on the mechanism of isotope exchange reactions, preparation and reactions of biological active labelled compounds.

KOSSUTH LAJOS TUDOMÁNYEGYETEM, DEBRECEN

ALKALMAZOTT FIZIKAI TANSZÉK KLTE

Institute for Applied Physics of the Kossuth Lajos University Debrecen.

Address: Debrecen 10, Egyetem tér 1.

Director: Prof. Ferenc J. Kedves, C. Sc.

The research of the Institute covers mainly metal physics (investigation of atomic migration, defect structure and interaction of defects in metals and alloys); chemical effects of ionizing radiations; thermoluminescence.

ÁLLATTANI INTÉZET KLTE

Institute of Zoology of the Kossuth Lajos University of Debrecen.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Elek *Woynárovich*, D. Sc.

Hydrobiological research and investigations related to the problems of neurohumoral regulation of cell metabolism are the particular interests of the Institute. Typical investigations include the metabolism and oxygen consumption of different water animals and the effect of mitosis-influencing on the embryonic development of a species of amphibian (*Pleurodeles*). Another area of research is concerned with the neurohumoral regulation of nucleic acid metabolism of striated muscle tissue and the study of nervous and hormonal regulation of fat metabolism in normal and pathological conditions. The carbohydrate metabolism in carcinomic cells is also being studied.

Publications: Kossuth Lajos Tudományegyetem Állattani Intézet Közleményei (Communications of the Zoological Institute of the University of Debrecen). Monograph series.

ÁSVÁNY- ÉS FÖLDTANI INTÉZET KLTE

Mineralogical and Geological Institute of the Kossuth Lajos University.

Address: Debrecen 10. Egyetem tér 1.

Director: Prof. Gábor *Pantó*, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

Research at the Institute involves volcanology and sedimentary petrology.

Publications: Acta Universitatis Debreceniensis de Ludovico Kossuth Nominatae. Ser. Geographica, Geologica et Meteorologica.

ELMÉLETI FIZIKAI INTÉZET KLTE

Institute for Theoretical Physics of the Kossuth Lajos University of Debrecen.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Rezső *Gáspár*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

Projects undertaken by the Institute cover the proton affinity of water; model calculations on small molecules; investigations with the aid of an analytic universal potential for one-electron atomic properties; explicit *Z*-dependent theory of atoms; applications of pseudopotentials in the theory of atoms, molecules and solids; energy band calculations on the semiconductors selenium and tellurium; theoretical determination of the collision potential of inert gases; elastic scattering of low energy electrons on inert gases; cohesion energy determination of alkali halide molecules and crystals. The literature indicates interest in the united atom model theory of hydrides.

IZOTÓP LABORATÓRIUM KLTE

Isotope Laboratory of the Kossuth Lajos University of Debrecen.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Lajos *Imre*, D. Sc.

Papers published by the Institute cover a variety of interests: design and layout for special air-cleaning equipment for a radioisotope laboratory, the thermodynamics of surface reactions of radioactive substances, the deposition of radioactive substances on a platinum anode, a kinetic study of cathodic and anodic deposition, investigation of the corrosion of amalgams and other metals with the aid of radioactive indicators, and the isolation of radioactive isotopes by electrochromatography.

KÍSÉRLETI FIZIKAI INTÉZET KLTE

Institute for Experimental Physics of the Kossuth Lajos University in Debrecen.

Address: Debrecen 1. Bem tér 18/a.

Director: Prof. Gyula J. *Csikai*, D. Sc.

The Institute is carrying out active research work in low-energy nuclear physics. The research of the Institute is centered chiefly on its neutron generators by means of which neutron reactions are investigated. Charged particle reactions are investigated by means of an open air type Van de Graaff generator. The Institute collaborates with the Institute of Nuclear Research (ATOMKI) of the Hungarian Academy of Sciences, Debrecen.

METEOROLÓGIAI INTÉZET KLTE

Meteorological Institute of the Kossuth Lajos University of Debrecen.

Address: Debrecen 10.

Director: Associate Professor János *Justyák*, C. Sc.

The Institute carries on investigations in the fields of climatology, radiation, atmospherical radioactivity and, especially, agrometeorology.

Publications: Kossuth Lajos Tudományegyetem Meteorológiai Intézetének Közleményei (Publications of the Meteorological Institute of the Kossuth Lajos University). Series. (H; e, g, r).

NÖVÉNYTANI INTÉZET KLTE

Institute of Botany of the Kossuth Lajos University of Debrecen.

Address: Debrecen 10. Egyetem tér.

Director: Prof. Árpád *Haraszty*, C. Sc.

Among its activities the Department studies the histogenesis of plants with particular reference to the structure and organization of root tip and stele formation of Caryophyllaceae and to the effect of fertilizers on the fibre formation and quality of *Cannabis sativa*. Other work includes the analysis of growth and ageing processes in plants and their relation to injuries, the analysis of protein fractions of plants and their role in the regulation of cell metabolism, and the study of the regulation and organization in plant communities by means of mathematical models.

Publications: Acta Biologica Debrecina.

SZERVES KÉMIAI INTÉZET KLTE

Institute of Organic Chemistry of the Kossuth Lajos University.

Address: Debrecen 10. Egyetem tér.

Director: Prof. Rezső *Bognár*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Research work at the Institute is being carried out on carbohydrate chemistry with emphasis on the preparation of new heterocyclic carbohydrate derivatives and investigation of nitrogen glycosides. In investigations on alkaloids, the main interests have been the production and transformation of poppy alkaloids and examination and transformation of steroidalkaloid-glycosides. In flavonoid

chemistry, the Institute is doing research on new transformations and synthesis of derivatives of flavoids and related stereochemical problems. Investigation of the chemical structure of new antibiotics is another area of interest.

Antibiotikum Kémiai Kutató Csoport MTA (Research Group for Antibiotic Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences) is affiliated with this Institute.

SZERVETLEN- ÉS ANALITIKAI KÉMIAI INTÉZET KLTE

Institute of Inorganic and Analytical Chemistry of the Kossuth Lajos University.

Address: Debrecen 10.

Director: Prof. Pál Szarvas, D. Sc.

The Institute conducts research on methods and reagents for use in inorganic analysis and inorganic structural chemistry. Articles published in the literature cover: the use of cacothelin as an oxidation-reduction indicator, the use of rutin as an analytical reagent for metals and in chromatographic analysis; and methods for the detection of titanium or vanadium or small amounts of iron, etc.

Publications: A KLTE Szervetlen- és Analitikai Kémiai Intézetének Közleményei (Communications of the Institute of Inorganic and Analytical Chemistry of the University of Debrecen).

ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEMEK

SEMMELWEIS ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEM, BUDAPEST

I. ANATÓMIAI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Department of Anatomy of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest, IX., Tűzoltó u. 58.

Director: Prof. János *Szentágothai*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute is working on experimental neuroanatomy, especially on investigations into the elementary structure (electron microscopy, fluorescent microscopy and histochemistry) of synapses and synaptic arrangements between neurons; degeneration studies are used for tracing various pathways of the central nervous system and for identification of their synaptic terminals. Connectivity (numerical, geometrical and topological) parameters of various neuron networks are studied and attempts are made at modelling the possible functions of these neuron nets, partly using computer simulation.

II. SZ. ANATÓMIAI, SZÖVET- ÉS FEJLŐDÉSTANI INTÉZET

2nd Department of Anatomy, Histology and Embryology of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest IX., Tűzoltó u. 58.

Director: Prof. Béla *Halász*, C. Sc.

The experimental work in the Department is mainly concerned with the neuroendocrine system i.e. with the neural mechanisms controlling anterior pituitary function. Various aspects of this subject, such as neuronal connections between the regulatory elements, site of production of the so-called hypothalamic releasing and inhibiting factors, functional capacity of the neural structures involved in the control etc., are studied.

BIOFIZIKAI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Biophysics of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 9.

Director: Prof. Imre *Tarján*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The scientific program of the Institute consists of research on the effect of ionizing radiation on alkali halide crystals and on biological objects. Results have been obtained in the field of crystal growth and procedures have been developed for the production of some technical monocrystals too. Research pertaining to the former is done by the Research Group for Crystal Physics of the Hungarian Academy of Sciences associated with the Institute.

BIOKÉMIAI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute for Biochemistry of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 9.

Director: Prof. Vilma *Széekessy-Hermann*, C. Sc.

The Institute is mainly engaged in biochemical investigations concerning the metabolism of muscles. Of special prominence are the investigations on the protein synthesis of experimental muscle dystrophies, the changes in enzyme activity, and the metabolism of nucleic acids. Other investigations are being performed also in the fields of lipid metabolism and the utilization of pyruvic acid.

ÉLETTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Physiology of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 9.

Director: Prof. Péter *Bálint*, Corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute conducts research on the physiology and pathophysiology of the kidney. Specific studies include regulation of renal blood flow and glomerular filtration rate, and tubular secretory capacity in experimental acute renal failure. The mechanism of aldosterone secretion and the role of neurohumoral factors in the regulation of steroid secretion are being studied.

GYÓGYNÖVÉNY ÉS DROGISMERETI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Pharmacognosy of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Üllői út 26.

Director: Prof. János *Halmai*, C. Sc.

The Institute of Pharmacognosy of the Medical University of Budapest deals with the scientific study of crude drugs of vegetable origin. It is studying the general macroscopical and microscopical properties of the medicinal plants, and the isolation of their constituents, particularly with known agents. During recent years the Institute has been conducting research on the chemical properties of the Solanace alkaloids with modern methods on the chromatographic isolation of main alkaloids. They deal with some analytical problems of other alkaloids: e.g. the alkaloids of *Chinae cortex* and make a trial of a new method for the quantity determination and isolation of alkaloids. They have been conducting research on the chemical, physical and biological properties of the alkaloids and other constituents of *Senecio vulgaris*.

They deal with the history of Hungarian pharmacy.

GYÓGYSZERÉSZETI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Pharmaceutical Institute of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest IX., Hőgyes Endre u. 7.

Director: Prof. László *Gyarmati* C. Sc.

The research work of the Institute is concerned first and foremost with solving of the pharmaceutical technology problems of manufacture in the preparation of stable solutions, suspensions, tablets, etc.

Further research work deals with working out the problems of hospital pharmacy, e.g., preparation of transfusions, ophthalmic solutions and ointments.

Another important part of the work of the Institute is conducting experiments on sterilization by radiation.

GYÓGYSZERÉSZI KÉMIAI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Pharmaceutical Chemistry of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 11–13.

Director: Prof. Antal *Végh*, C. Sc.

The Institute's main field of research is directed toward working out new procedures of the control of drugs. They are engaged more thoroughly in the critical study and improvement of the application of paper-, thin-layer- and gas-chromatographic methods for the purposes of drug identification, purity and stability.

GYÓGYSZERTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Pharmacology of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Üllői út 26.

Director: Prof. József *Knoll*, Corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute, which is engaged in research on new drugs and methods for testing them, has used psychophysiological, psychopharmacological, electroencephalographical, and neurobio-

chemical methods to establish a theory of the behavior of rats based on the reflex principle. On the strength of this theory, new specific psychopharmacological methods were introduced (Knoll's jumping test for discrimination between major tranquilizing and other central depressive effects; the modified jumping test for testing psychostimulant, psychoenergetic and psychotomimetic drugs; Knoll—Vajnovszky's motimeter, etc.). By the aid of these methods a new group of major tranquilizers, compounds with characteristic antidepressant effects and a new group of non-narcotic analgetics were found.

Celluline, a highly specific cell membrane factor, with a prominent effect on ion movements across the membrane, has been discovered and studied. Celluline possesses a strong cardiotonic activity on frog's heart and mammalian heart preparations.

I. KÓRBONCTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

First Institute of Pathology, of the Semmelweis Medical University Budapest.

Address: Budapest VIII., Üllői út 26.

Director: Prof. Károly *Lapis*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

In addition to the study of the carcinogenic effect of various chemicals, the mechanism of action of new cytostatic compounds is being studied with various methods. The immunosuppressive effect of these agents is studied in model experiments. Studies are carried out also on arteriosclerosis and on the effect of the pancreatic elastase enzyme.

II. KÓRBONCTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Second Department of Pathological Anatomy of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest IX., Üllői út 93.

Director: Prof. Harry *Jellinek*, D. Sc.

The Department's research covers the problem concerning pathogenesis of vessel-diseases, fibrinoid vessel-wall necrosis and questions of regeneration of vessel-wall. Special attention is given to the ultra structure of guinea pig tumors and to the role of its virus-like corpuscles in the tumorigenesis.

They are carrying out further investigations on the pathomorphology of gerontological changes in cases of senile emphysema and senile pigment.

KÓRÉLETTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Pathophysiology of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest IX., Högyes Endre u. 9.

Director: Prof. József *Sós*, corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

In the Institute, pathophysiological experiments concerning the problems of nutrition, cardiovascular diseases, neuroendocrinology, and gastroenterology are being studied.

Publications: A Budapesti Orvostudományi Egyetem Kóréletani Intézetének Közleményei (Publications of the Institute of Pathophysiology of the Medical University Budapest).

MIKROBIOLÓGIAI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute for Microbiology of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest IX., Högyes Endre u. 7/9.

Director: Prof. Zoltán *Alföldy*, C. Sc.

The research conducted at the Institute comprises three principal areas of study:

1. virological research with special reference to the adenovirus problem, its epidemiological and theoretical questions;

2. continuing studies on the leptospirosis, involving both epidemiological and laboratory efforts;

3. research of the immunological function of the thymus and experimental study of immunodepressive states brought about by different methods.

ORVOSI VEGYTANI INTÉZET, SEMMELWEIS OTE

Institute of Medical Chemistry of the Semmelweis Medical University of Budapest.

Address: Budapest VIII., Puskin u. 9.

Director: Prof. Ferenc *Antoni*, D. Sc.

The principal areas of endeavour of the Institute cover a wide range and include the bio-chemistry and synthesis of mammalian and microbial enzymes.

SZERVES VEGYTANI INTÉZET, GYÓGYSZERÉSZTUDOMÁNYI KAR,
SEMMELWEIS OTE

Institute of Organic Chemistry of the Semmelweis Medical University of Budapest, Faculty of Pharmaceutical Sciences.

Address: Budapest IX., Högyes Endre u. 7.

Director: Prof. Ottó *Clauder*, C. Sc.

The Institute's research is directed along two scientific lines. In the field of pharmaceutical chemistry, research covers the relation of the chemical structure and physiological action. In the field of alkaloid chemistry, scientific research work includes the isolation, structure-research and synthesis of the alkaloids; the transformation of the structure of alkaloids by partial synthesis to compounds more active physiologically; and the relation of the chemical structure and physiological action of the alkaloids.

DEBRECENI ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEM

ANATÓMIAI, SZÖVET- ÉS FEJLŐDÉSTANI INTÉZET, DOTE

Institute of Anatomy, Histology, and Embryology of the Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen 12.

Director: Prof. István *Krompecher*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute is conducting research on the causal histogenesis of supporting tissues, namely on cartilage and bone tissue: their ultrastructural, histochemical, biochemical (mucopolysaccharides), and metabolic properties, under normal, regenerative, experimental, and pathologic conditions.

BIOFIZIKAI INTÉZET, DOTE

Institute of Biophysics of the Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen, Bem tér 18/b.

Director: Sándor *Damjanovich*, C. Sc.

Radiobiophysics, quantumbiochemistry, dielectric and infrared spectroscopy of biological macromolecules.

ÉLETTANI INTÉZET DOTE

Institute of Physiology, Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen 12.

Director: Prof. Emil *Varga*, C. Sc.

The scope of the research programs involves studies on the relationship between excitation process and contraction in muscle, passive and active ion movement across muscle cell membrane as well as in the sarcoplasmic reticular system. Investigations are being performed on muscle cholinesterase and on adenosinetriphosphatase and cholinesterase activity of the sarcoplasmic reticular system.

GYÓGYSZERTANI INTÉZET DOTE

Pharmacological Institute of the Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen 12.

Director:

The main research activities are centered around study of the chemotherapeutic drugs influencing cell division. New antibiotics with antibacterial (primycin) and antifungal (polyenes) properties have been produced, and their pharmacobiochemical characterization is carried out.

The modification of the lethal effect of X-ray by thiol compounds and the mechanism of the antitumour effect of the cytotoxic hexitols (Dibromodulcitol etc.) are studied at molecular-pharmacological level.

MIKROBIOLÓGIAI INTÉZET DOTE

Institute of Microbiology of the Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen 12.

Director: Prof. Lajos *Vácz*, C. Sc.

Studies reported from the Institute in the field of microbiology include: research on pathogenic changes and intracellular location of the viral antigen; investigation of the effectiveness of semisynthetic penicillin against staphylococcus aureus; and attempts at the isolation of herpes zoster virus and its reproduction. Comparative studies have been conducted to determine the amounts of interferon formed by different methods of production as well as the sensitivity of parainfluenza virus I to the drug. The biological role of bacterial lipids and the lipid composition of the different bacteria are also being studied.

ORVOSI VEGYTANI INTÉZET DOTE

Institute of Medical Chemistry of the Medical University of Debrecen.

Address: Debrecen, Bem József tér 18/b.

Director: Prof. György Bot, C. Sc.

Research on enzymes and the enzymatic regulation of glycogen metabolism is being conducted at the institute.

PÉCSI ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEM

ANATÓMIAI INTÉZET POTE

Department of Anatomy of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Szigeti út. 12.

Director: Prof. Béla *Flerkó*, D. Sc.

The main lines of research in progress in the Department of Anatomy concern functional anatomy of neuroendocrine regulations and experimental neuroembryology. Projects in the field of neuroendocrinology include the study of the role of hypothalamic and epithalamic structures in the control of gonado-, thyreo- and adrenocorticotrophic hormone secretion and of the function of the cell system of the pancreatic Langerhans isles.

Projects in the field of experimental neuroembryology include investigations through neuroembryological recombination experiments into the development of reflex patterns; the analysis of the specific segmental apparatus for stepping movements of fore- and hindlimbs, with the aid of early transplantation and interchanges of segmental groups of the medullary tube, and recording muscle potentials from limb muscles of freely moving animals; histological study of the amphibian visual center.

BIOFIZIKAI INTÉZET POTE

Institute of Biophysics of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Rákóczi út 80.

Director: Prof. Jenő *Ernst*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

Scientific exploration at this Institute is generally concerned with muscular biophysics and the mechanism of biostructure. Research is being conducted on the biophysics of the striated muscle, the phenomena of fluid-mobilization and changes in concentration (thermosmosis), the excitation and semiconducting properties of biological tissues; and the achievement of positive biological effects by means of ionizing radiation.

The Biofizikai Akadémiai Kutató Csoport (Academic Research Group for Biophysics) forms a part of the Institute of Biophysics.

ÉLETTANI INTÉZET POTE

Institute of Physiology of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Rákóczi út 80. and Szigeti út 12.

Director: Prof. Kálmán *Lissák*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute conducts research on the central nervous system and the functioning of the brain. Animal studies cover such areas as the role of central nervous activating and inhibitory structures in the control of pituitary adrenocortical function, encephalographic investigations of arousal reactions, conditioned avoidance reflex under various physiological states, and the effect of chronic stress on the activity of the pituitary.

One of the central problems of the Institute is a multidimensional (behavioural, neurophysiological, and electrophysiological) investigation of the conditioning process. Lately, the Institute has made use of cybernetics and information theory principles and methods (data collection and processing, average computing, correlation techniques) in the conduct of this research. Another area of investigation deals with the humoral control of animal behaviour, the nature of "drive" in relation

to the development of temporary connections, and the somatomotor pattern in relation to the basic processes of learning. Neuroendocrinological investigations, also under way, deal with the study of central nervous control of the pituitary-adrenocortical function.

IGAZSÁGÜGYI ORVOSTANI INTÉZET POTE

Institute of Forensic Medicine of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Dischka Győző u. 5.

Director: Prof. Róbert *Budvári* C. Sc.

Research performed by the Institute concerns laboratory methods in traffic accident pathology and forensic immunology.

KÉMIAI INTÉZET POTE

Institute of Chemistry of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Rákóczi út 80.

Director: Prof. Dezső *Szabó*, C. Sc.

Recent work from the Institute, which has been published in the literature, includes: acid-catalyzed cyclization of phorone in a nonaqueous medium; polymerization of phorone; investigation of the alkaline hydrolysis of double bonds in an α -position in respect to the oxo group in carotenoids; and isolation and identification of the antibacterial substance in *Kniphofia Uvaria*. Studies concerning the structure and various conversions of carotenoids.

KÓRBONCTANI INTÉZET POTE

Department of Pathology of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Dischka Győző u. 5.

Director: Prof. György *Romhányi*, C. Sc.

The Department studies submicroscopical morphology, optical polarization, and electron-microscopy and histochemistry, with special emphasis given to research on connective tissue, nucleic acid, and blood building organs.

KÓRÉLETTANI INTÉZET POTE

Pathophysiological Institute of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Kossuth tér 3/a.

Director: Prof. Szilárd *Donhoffer*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The research work of the Institute covers thermoregulation and regulation and selection of food intake. Pathophysiology of the respiratory system is also studied in the Institute.

KÖZEGÉSZSÉGTANI INTÉZET POTE

Institute of Hygiene of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Szigeti út 12.

Director: Prof. János *Pater*, C. Sc.

The Institute deals with lead poisoning survey of industries. Environmental influences on health and noise control of urbanized and rural population are studied. Occupational climate factors and their importances and hazards are observed in medical staffs, industrial workers. Climate and environmental factors of holiday camp centers are studied, complex health and environmental health survey of offices and bureaus so as of chemist's shops and hairdresser's saloons are developed. A study of staphylococcal infection in hospitals and school hygiene control is carried out. Water pollution and different types of waste, drinking and ground water are estimated.

MIKROBIOLÓGIAI INTÉZET POTE

Institute of Microbiology of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, Szigeti út 12.

Director: Prof. Károly *Rauss*, D. Sc.

For more than twenty years, the Institute has conducted research on antigen structure, antigen chemistry, and the immunomechanism of enteric bacteria.

SEBÉSZETI MŰTÉTTANI INTÉZET POTE

Institute for Experimental Surgery of the Medical University of Pécs.

Address: Pécs, III. Kodály Z. u. 20.

Director: Associate Prof. Béla *Török*, D. Sc.

The Institute's program of investigation includes experimental surgical cardiology in such areas: as circulation in artificially induced heart diseases and in their postoperative states; heart revascularization in experiments; and organ transplantations. In addition to the heart, the Institute has interest in large vessels, alloplastic materials, grafts, and prostheses in surgery.

SZEGEDI ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEM

BIOKÉMIAI INTÉZET SZOTE

Biochemical Institute of the Medical University of Szeged.

Address: Szeged, Dóm tér 9.

Director: Prof. Ferenc *Guba*, D. Sc.

The Institute has devoted considerable attention to a study of the motion as a general phenomenon of life. The ultrastructure and the proteins of different types of muscles (striated-, heart-, smooth muscles) and other contractile systems (e.g. T even phages) have been studied in connection with their function.

Studies are going on concerning the cell differentiation. Interest has been laid on the investigation of the effect of radiations and hormones on differentiation. The connections between the differentiation and metabolism, and differentiation and ultrastructure have been studied as well.

BIOLÓGIAI INTÉZET SZOTE

Biological Institute of the Medical University of Szeged.

Address: Szeged, Kossuth Lajos u. 35.

Director: Prof. György *Kiszely*, C. Sc.

The Institute's research has been directed, in general toward genetics, including human genetics. In the field of general genetics, the inheritance of immunobiological characters (complement titer and serum bactericidal activity) has been studied, while, in human genetics, the scientific program has included the analysis of human chromosomes. In this area investigations related to cytology, and bioelectric phenomena are in progress.

ÉLETTANI INTÉZET SZOTE

Institute of Physiology of the Medical University of Szeged.

Address: Szeged, Dóm tér 10.

Director: Prof. Ferenc *Obál*, D. Sc.

The Institute's main task is to elucidate the discrete central nervous and humoral mechanisms controlling the vegetativ homeostasis of the organism. One area of research, as reported in the literature, is the regulation of body temperature and basal metabolism under hypoxemic conditions. Another study concerns the hindering of the lymphatic drainage from the brain by ligating the cervical lymphatic vessels. Another area of research is based on electrophysiological methods such as EEG, evoked responses, transfer functions of sensory pathways, etc.

A differential-circuit thermistorized blood-flow meter developed in the Institute ensures pen-recorded flow curves from the brain, kidney and heart muscle. The method is said to be more sensitive than the thermocouple-flowmeters.

Recently a special-purpose hybrid computing device has been developed in order to achieve the on/off-line frequency analysis of human or animal EEGs, evoked responses and other electrophysiological variables. As input periphery analog magnetic tape or biological amplifier can be used. An ink-record curve-reader is under development. Output facilities are: X—Y plotter, printer, digital tape and punched tape. The system of the information-storage on the digital and punched tapes ensures direct accessibility to general purpose digital computers.

GYÓGYSZERTECHNOLÓGIAI INTÉZET SZOTE

Institute of Pharmaceutical Technology of the Medical University of Szeged.

Address: Szeged, Eötvös u. 2.

Director: Prof. György *Kedvessy*, C. Sc.

The principal field of investigations of the institute includes manufacturing of different dosage forms especially in its colloidphysical aspects. Recently rheological investigation on ointment an suppository-bases and some hydrophilic sols were performed, and the release of drugs from ointments and suppositories was studied. Structural features and the factors influencing physical parameters of compressed tablets have been extensively investigated.

MIKROBIOLÓGIAI INTÉZET SZOTE

Microbiological Institute of the Medical University of Szeged.

Address: Szeged, Belső utcák tér 10.

Director: Prof. György *Ivánovics*, member of the Hungarian Academy of Sciences.

In the area of bacteriocins and bacteriocin-like substances, studies have been made at the Institute on bacteriocins elaborated by *Bacillus megaterium* and on auxotrophic mutants of *Bacillus anthracis*. Other investigations include subtilis phages and the regulation of protein synthesis in *E. coli*. Different mammalian viruses, such as entero-, adeno-, and herpes-viruses, are also extensively studied.

MŰSZAKI EGYETEMEK

BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM

ATOMFIZIKAI TANSZÉK BME

Department of Atomic Physics of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Budafoki út 8.

Director: Prof. István Kovács, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The department has carried out investigative work on the rotational structure in the spectra of diatomic molecules, especially on the field of multiple transition, intensity distribution and perturbation. The research work is going on both theoretical and experimental field. At the field mentioned above after about many publications have coming out for 35 years a monograph reckoning on great interest was published in a common edition of the Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences and of Adam Hilger LTD, London. Moreover an American edition also was published by American Elsevier Publishing Company Inc., New York.

Experimental research works are going on from the subject of "Ionic impact phenomenon" in gases. A complex measurement equipment was completed, with what on one hand the ion mobility is available to measure, on the other hand it is identifiable with quadrupole mass-spectrometer. With this equipment it was determined the mobility of mass identified protons in Helium gas.

ÁLTALÁNOS ÉS ANALITIKAI KÉMIAI TANSZÉK BME

Department for General and Analytical Chemistry of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Gellért tér 4.

Director: Ernő Pungor, corr. member of the Hung. Acad. of Sci.

The research of the Institute involves various domains of chemical analysis. The investigation is going on in four research groups dealing with electroanalysis, thermal analysis, radioanalysis and different micro-analytical methods (atomic absorption, infrared spectroscopy, spectrum analysis, gas chromatography).

ÁRAMLÁSTANI TANSZÉK BME

Department for Fluid Mechanics of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Bertalan Lajos u. 4—6.

Director: Prof. József Gruber, D. Sc.

The duty of prime necessity of the Dept. is the instruction of the subject Fluid Mechanics. Moreover it is performed a wide-spreading research work which tends mostly to the field of Turbo-machinery. Based on the request of the industry there are solved different fluid- and gasdynamical problems and made windtunnel investigations too.

EGYETEMI ATOMREAKTOR BME

Nuclear Reactor, Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műegyetem rakpart 9.

Head: Gyula Csom.

The Nuclear Reactor (Technical University of Budapest) as an inter-universities institution serves educational and research purposes mainly at the Mechanical-, Chemical- and Electrical Engineering Faculties of the Technical University and at the Faculty of Sciences of the Lorand

Eötvös University, secondly at other universities belonging to the Ministry of Education. It is used in the field of nuclear engineering, nuclear energetics, isotope technique, nuclear physics etc., mainly in practical training. The fundamental importance of the reactor lies in the fact that it produces the modern experimental possibilities essential in the above fields.

ELEKTRONCSÖVEK ÉS FÉLVEZETŐK TANSZÉK BME

Department of Electron Tubes and Semiconductors of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Goldmann György tér 3.

Director: Prof. Iván Péter *Valkó*, D. Sc.

The Department conducts basic research in the field of physical electronics, and applied research in the evaluation of high-frequency phenomena, noise and reliability of solid-state devices and microcircuits. A further field of interest is the modelling of devices.

ÉLELMISZERKÉMIA TANSZÉK BME

Department of Food Chemistry of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műegyetem rakpart 3.

Director: Prof. László *Telegdy-Kováts*, D. Sc.

Main directions of the Dept's research activities include: fine structure of natural substances of foodstuffs (e.g. fine structure of proteins, carbohydrates, lipids, vitamins and hormones, aromatic substances etc.), their isolation and determination; grading of food quality, and the mathematical statistical analysis of quality; study of rheological properties, colour, taste and odour of foods; preservation, storage and packaging of foods; study of alterations of foods caused by heat; sensoric analysis.

I. ÉPÜLETGÉPÉSZETI TANSZÉK BME

I. Department for Heating, Ventilation, Air-Conditioning of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műegyetem rakpart 3/9.

Director: J. *Menyhárt*, D. Sc.

The Department deals with heating technical problems, carrying out related investigations belonging to fundamental research as well. For instance: the study of the temperature conditions of media conducted through underground canals and of the surrounding ground joins the investigations dealing with the heating of buildings.

FIZIKAI TANSZÉK BME

Department of Physics of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műegyetem rakpart 3—9.

Director: Prof. Albert *Kónya*, Corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute is interested in the statistical theory of atoms and its application in molecular binding; solid state and nuclear physics and the quantum mechanical many-body problem; experimental research in low pressure physics; and problems of high vacuum technology.

FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉK BME

Department for Physical Chemistry of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műegyetem rakpart 3.

Director: Prof. György *Varsányi*, D. Sc.

The Department is very active in the field of molecular spectroscopy, especially on vibrational spectra of benzene derivatives (a monograph of Prof. Varsányi was published by the New York Academic Press.), methods of normal coordinate analysis, a new theoretical treatment of large amplitude vibrations and rotational structure of vibrational bands. Several papers have been published on the u. v. light absorption of heterocyclic compounds.

The Department deals with the thermodynamics of adsorption phenomena on free and solid surfaces of binary mixtures and with the use of gas chromatography for research on reactions on solid surfaces and has elaborated new methods of neutron activation analysis for trace element determination. The Physics Research Group of the Institute is investigating the principal theoretical and experimental bases of nonequilibrium thermodynamics with particular reference to the rate of electrochemical transport.

FOLYAMATSZABÁLYOZÁSI TANSZÉK BME

Department of Process Control of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műgyetem rakpart 9.

Director: Prof. Andor *Frígyes*, C. Sc.

The Department conducts research in applied mathematics of control and switching theory, computer hardware and software, measurement theory of various physical quantities, analog and digital control systems.

Date of founding: 1965.

GÉPÉSZKARI MATEMATIKAI TANSZÉK BME

Department of Mathematics of the Technical University of Budapest, Faculty of Mechanical Engineering.

Address: Budapest XI., Műgyetem rakpart 3—5.

Director: Miklós *Farkas*, C. Sc.

The Department conducts research in the field of the theory of differential equations. In details: differential equations of mathematical physics and qualitative theory of differential equations.

Publications: Periodica Polytechnica, Annales Univ. Sci. Eötvös, Sectio Mathematica.

HŐERŐMŰVEK TANSZÉK BME

Department of Thermal Power-plants of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Műgyetem rakpart 7.

Director: Prof. András *Lévai*, corr. member of Hung. Academy of Sciences.

The scope of the scientific work of the Department extends to problems related to the design of thermal and nuclear power-plants and to general problems of energetics. The possibilities of the use of isotopes in energetics are studied.

KÉMIAI TECHNOLÓGIAI TANSZÉK BME

Department of Chemical Technology of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Budafoki út 8.

Director: Imre *Szebényi*, C. Sc.

The chief fields of activity of the institute are the following: Technological investigations aiming at the utilisation of natural and cracked hydrocarbons. The production of catalysts employed in the processing of hydrocarbons. The investigations and utilisation of industrial waste waters. The application of radiochemistry in technology and the improvement of its measuring techniques. Investigations in the field of ceramic systems made of electrocorundum and silicon carbide for grinding tools. The principal results are among others: The investigation of native hydrocarbons, the determination of the trace element — chiefly vanadium — content of the mineral oils processed in Hungary. The elaboration of testing methods concerning the end products of cracking procedures.

The elucidation of wearing processes of the grinding tools made of electrocorundum. The development of prototypes of very efficient grinding tools.

The institute was founded in 1870.

KÍSÉRLETI FIZIKAI TANSZÉK BME

Department for Experimental Physics of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Budafoki út 8.

Director: Prof. Jolán *Zemplén* (Mrs. Mátrai), D. Sc.

Research work in the Department done in three main subjects: The most established field is the research on crystal growth, dislocation, whiskers and defect structure of crystals. The core of this work is the Research Group for Crystal Growth of the Hungarian Academy of Sciences.

There is also an important work done in the subject of building-physics, mostly on the hydration of concrete and the physical properties of building materials.

A smaller group is doing researches in the history of science.

SZERVETLEN KÉMIAI TANSZÉK BME

Department for Inorganic Chemistry of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Gellért tér 4.

Director: József *Nagy*, D. Sc.

The research work of the Department consists of two main parts. Research of organometallic compounds (silicon compounds), producing the physico-chemical properties and investigating the bond and molecule structures and studying the practical applications of organometallic-compounds (silicon-rubbers, resins, silicon-putties and vacuum-oils...). The second main research field is the investigation of the corrosion-phenomena and anti-corrosives.

VÍZGÉPEK TANSZÉKE BME

Department of Hydraulic Machinery of the Technical University of Budapest.

Address: Budapest XI., Stoczek u. 2.

Director: Prof. József *Varga*, D. Sc.

Research work in the Department is done: Cavitation flow, cavitation erosion, acoustic investigation of the cavitation noise, scale effects connected with the cavitation phenomena, Flow in stationary and rotating cascades.

NEHÉZIPARI MŰSZAKI EGYETEM, MISKOLC

ÁLTALÁNOS ÉS FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉK NME

Department of General and Physical Chemistry, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. Endre *Berecz*, C. Sc.

The research activity of the department lies in the physical chemistry of liquid ionic systems (solutions of strong electrolytes, electrolyte and metallic melts).

The principal topic of investigations includes the studies of the structure and physico-chemical nature of binary and ternary acidic and alkaline aqueous salt solutions on the basis of an investigation of their thermodynamic, electrochemical and transport properties.

Structural and thermodynamic research is currently being carried out also on some salt and metal melt systems.

ÁRAMLÁS- ÉS HŐTECHNIKAI GÉPEK TANSZÉKE NME

Department of Fluid Machinery and Heat Engines, University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. Tibor *Czibere*, D. Sc.

Research work at the Department is done in two main fields: Cascade theory and its application to flow in the blading of turbomachines.

Heat transfer and processes in the internal combustion engines.

ELEKTROTECHNIKAI TANSZÉK NME

Department of Electrotechnics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Vilmos *Uray*, Assistant Professor.

Calculation of skin-effect in non-magnetic and ferromagnetic materials.

FÉMTANI TANSZÉK NME

Department of Physical Metallography, Metallurgical Faculty, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. Mihály *Káldor*, C. Sc.

The research work of the department consists in the examination of the transformations taking place in metals and alloys by the influence of heat and mechanical work.

FIZIKAI TANSZÉK NME

Department of Physics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. János *Szabó*, C. Sc.

Research work at the Department is done in the field of plasma physics, mostly on the theory of kinetic equation of plasma, waves and shock waves in plasma.

A smaller group is doing researches in the theoretical problems of MHD generators.

GEOFIZIKAI TANSZÉK NME

Department of Geophysics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. János Csókás.

Prospecting in applied geophysics; especially magneto-telluric, well logging, mining geophysics, seismic effect of blasting on buildings, geophysical methods in civil engineering, physics of soils and rocks.

MATEMATIKAI TANSZÉK NME

Department of Mathematics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. Gyula Gáspár, C. Sc.

Functional equations and their applications. Theory of matrices and determinants. Numerical solution of differential equations of the mathematical physics by computer.

MECHANIKAI TANSZÉK NME

Department of Mechanics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Imre Kozák, C. Sc.

Research in applied mechanics on problems concerning structures in machinery.

SZERVETLEN ÉS ELEMZŐ KÉMIAI TANSZÉK NME

Department for Anorganic and Analytical Chemistry, Technical University for Heavy Industry, Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Professor János Bognár, C. Sc.

Research on the analysis of metals, metallurgical analysis; catalytic reaction-kinetical trace-analysis especially for the determination of trace-impurities and trace-alloying elements, kinetic and instrumental development of the method. Development of procedures for spectral analysis: research on excitation, especially on excitation by yarn-sparks, microanalytical research for the analysis of inclusions. Research on indicators. Investigations of the mechanism of reactions.

VASKOHÁSZATTANI TANSZÉK NME

Department of Ferrous Metallurgy, Technical University for Heavy Industry Miskolc.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Head of Department: Prof. Sándor Simon, D. Sc.

Research work in done is the following subject sphere: Research of the theoretical ground of iron-metallurgical processes with the aim of making high-purity products and increasing recovery.

VESZPRÉMI VEGYIPARI EGYETEM

ANALITIKAI KÉMIA TANSZÉK VVE

Department of Analytical Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. János *Inczédy*, D. Sc.

Use of complex equilibria in the analytical chemistry. Development of separation and spectrochemical procedures.

ÁLTALÁNOS ÉS SZERVETLEN KÉMIA TANSZÉK VVE

Department of General and Inorganic Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Endre *Bodor*, C. Sc.

Preparation of new complex compounds and their thermal and spectrographic study.

ÁSVÁNYOLAJ ÉS SZÉNTÉCHNOLÓGIA TANSZÉK VVE

Department of Mineral Oil and Coal Technology of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. László *Péchy*, C. Sc.

Preparation and study of additives to lubricating oils. Study of petrochemical processes and products.

ÁSVÁNYTANI TANSZÉK VVE

Department of Mineralogy of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Ernő *Nemecz*, D. Sc.

The main research activities concern the structure of different crystalline materials.

FIZIKAI KÉMIA TANSZÉK VVE

Department of Physical Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. József *Dévay*, D. Sc.

The research activity is concentrated in two fields: the study of electrode processes including the processes of electrochemical corrosion and on the other hand the study of thermodynamic properties and phase equilibria of mixtures.

KÉMIAI TECHNOLÓGIA TANSZÉK VVE

Department of Chemical Technology of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Pál *Káldi*, C. Sc.

Research is conducted in the field of the intensification of different processes of chemical technology especially in fluidization and foam-phase processes and in the study of the properties of different pigments.

RADIOKÉMIA TANSZÉK VVE

Department of Radiochemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Gyula *Straub*, C. Sc.

The main fields of research include the preparation of semiconductors and high-purity materials, study of the interaction of radiation with different materials and the development of the emission spectrography of electrically non-conducting materials.

SZERVES KÉMIA TANSZÉK VVE

Department of Organic Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. László *Markó*, D. Sc.

Research is conducted into different aspects of the catalytic reactions of hydrocarbons including the preparation and study of new catalysts.

SZILIKÁTKÉMIA TANSZÉK VVE

Department of Silicate Chemistry of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Márta *Déri*, D. Sc.

Investigation of the structure of ceramic dielectrics and semiconductors. Study of different materials used in heat-insulation.

VEGYIPARI MŰVELETEK TANSZÉK VVE

Department of Unit Operations of the Veszprém Technical University of Chemical Engineering.

Address: Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

Head of the Department: Prof. Antal *László*, D. Sc.

The research work of the Department includes the field of the reactors used in chemical technology including the mathematical models of the reactors and the field of the optimization of processes in the chemical technology.

ORSZÁGOS KUTATÓ INTÉZETEK

NATIONAL RESEARCH INSTITUTES

BÁNYÁSZATI KUTATÓ INTÉZET

Mining Research Institute.

Address: Budapest III., Mikoviny u. 2—4.

Director: Dr. Ferenc Martos, D. Sc.

Research, investigation and measurement of technical, technico-economical, organization and safety measures connected with the exploration, opening up, extraction and utilization of all kinds of minerals and other raw materials to be found in the earth's crust, with driving, forming and supporting various surface or underground excavations solving all problems of the industrial blasting technique and technology, performing researches, investigations and measurements connected with establishing, improving and operating industrial objects endangered by explosion and their equipment, undertaking documentation, creating standards and regulations, carrying out design and executing work necessary for the practical utilization of research results, working out experimental and manufacturing prototypes.

Publications: Bányászati Kutató Intézet Közleményei (in Hungarian), Publications of Hungarian Mining Research Institute (in English, French, German and Russian).

ERDÉSZETI TUDOMÁNYOS INTÉZET (ERTI)

Forest Research Institute.

Address: Budapest II., Frankel Leó út 44.

Director: Béla Keresztesi, D. Sc.

The objectives of the Institute include progress in seed management, seed orchards, and special seed investigations; improvement of species; development in growing seedlings; yield and tending studies; forest economy research; and exotic trees research. The Institute's staff members are also responsible for site examination by forest regions, considering melioration possibilities, and water; watershed management; poplar and willow production; mechanization and team-work; machine development and operation; protection against damages caused by animals and plants; and game. There are seven Research Stations under the Institute for regional research.

Publications: Erdészeti Kutatások (Forest Researches).

GYÓGYNÖVÉNY KUTATÓ INTÉZET

Medicinal Plant Research Institute.

Address: Budapest XII., Dániel út 38—42.

Director: Dr. Péter Tétényi, D. Sc.

The Institute devotes its major effort to research on cultivated and wild plants, which can be used in the preparation of medicines, essential oils, and aromatics. This includes their cultivation, acclimatization, and selection by means of modern methods of agrotechnology. New plant varieties are being developed, and improvement of chemical methodology related to medicinal plants is a part of the research effort.

Publications: Herba Hungarica.

GYÓGYSZERKUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Pharmaceutical Chemistry.

Address: Budapest IV., Szabadságharcosok útja 47—49.

Director: Tibor Láng, C. Sc.

The profile of activity of the Institute encompasses the development of manufacturing processes for important drugs, and specific research aimed at discovering new pharmaceuticals. It has departments of organic synthesis, pharmacology, microbiology, biochemistry, phytochemistry, and analytical chemistry as well as two pilot plants and an isotope section.

Much work has been done on the compounds exhibiting antitumoral activity. Numerous sugar derivatives of cytostatic effect have been produced. Some of these, for example Degranol, Mannogranol, Myelobromol and Zytostop, have been therapeutically employed. The decisive role of stereospecificity in the biological effects of this group has been established.

Various trialkoxybenzoyl derivatives, especially their amides, have been found to be minor tranquilizers, of which trimethoxy-benzoylmorpholine gained therapeutic use under the name Trioxazin. Extended investigations in this field led to compounds possessing other pharmacological effects. For instance the major tranquilizer Frenolon, a new phenothiazine derivative has been put on the market.

Besides the above-mentioned investigations, intensive research is going on in the field of tuberculostatics, antibiotics, and peptides. Human ACTH controlling the metabolism of corticosteroids has been successfully synthesized first all over the world in cooperation with the Institute of Organic Chemistry of Scientific University Budapest and Chemical Works of G. Richter Ltd.

The spectroscopy group of the analytical department works on the examination of IR, NMR and MS spectra of organic compounds with the aim of their structure elucidation. This activity also involves solution of problems of other Hungarian institutes working in the field of organic chemistry.

In addition to these, detailed investigations are going on to examine properties of solid phase IR-spectra in connection with the hydrogen bonds.

HUMÁN OLTÓANYAGTERMELŐ ÉS KUTATÓ INTÉZET

National Institute for Serobacteriological Production and Research "HUMAN".

Address: Budapest X., Szállás u. 5.

Director: Dr. Iván Vető.

The Institute produces prophylactic and therapeutic sera, human blood derivatives (gamma globulin, albumin), monovalent and combined vaccines, diagnostic preparations, blood substitutes and infusion solutions. The scientific activity of the Institute, closely correlated with these preparations, covers the fields of bacteriology, immunology, immunochemistry, and biochemistry.

Publications: Annales Immunologiae Hungaricae.

KERTÉSZETI KUTATÓ INTÉZET

Horticultural Research Institute.

Address: Budapest XXII., Budatétény Park u. 2.

Director: Béla Molnár, C. Sc.

The main activities of the Institute are: Breeding new fruit, vegetable and ornamental plant varieties with special interest to meet the demands of large scale farming; Development of improved technologies and management schemes for cooperatives and state farms; Studying the questions of organization, management and economy of horticultural farming; Studying biological requirements of plants, relevant basic research and methodology; Experimental control and introduction of new scientific and technical procedures on a large scale, extension and farm advising; Increase and manipulation of seed and clones of horticultural varieties; Display of a model in improved horticultural farming on a large scale.

The Institute was founded in 1950 as the basis of national horticultural research.

KERTÉSZETI KUTATÓ INTÉZET KUTATÓ ÁLLOMÁSA, FERTŐD

Research Station of the Horticultural Research Institute at Budapest.

Address: Fertőd, County Győr-Sopron.

Director: Károly Merényi, D. Sc.

Current research at the Station is directed toward breeding, cultivation techniques and plant protection of new varieties and hybrids of soft fruits.

Specific studies include the physiological control of plant growth, effect and interaction of plant growth substances and regulators, adventitious root formation, die back of raspberry canes.

KGM TÜZELÉSTECHNIKAI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Fuel Technology of the Ministry for Metallurgy and Engineering.

Address: Miskolc—Egyetemváros.

Director: István Csizmak.

The Institute's main activity includes the testing and construction of burners for industrial works. Problems of the modernization of furnaces, especially for oil and gas firing; new furnace designs in cooperation with industry; and furnace construction are also of special concern to the Institute.

Publications: Proceedings of the Industrial Seminar of the Institute.

KÖZÚTI KÖZLEKEDÉSI TUDOMÁNYOS KUTATÓ INTÉZET

Road Traffic Research Institute

Budapest XI., Thán Károly u. 3—5.

Director: Béla Szini.

Main areas of activities: research of objectives connected with transport politics and planning, public policies and operative problems related to the road traffic.

Main topics: transport economics; complex and infrastructural development; road-network development; environmental effects; safety; traffic regulations; development and operation of vehicles; construction and maintenance of roads and bridges; technical-economical and transport-organizational problems.

Departments: Transporteconomics, Road-safety and Traffic engineering, Road network Development, Road Construction and Maintenance departments and Bridge Construction, Scientific Information Service independent sections.

Publications: Proceedings of the Road Traffic Res. Inst. (yearly).

Road Traffic Studies (periodical).

MADÁRTANI INTÉZET

Hungarian Institute of Ornithology.

Address: Budapest XII., Költő u. 21.

Chief: dr. Albert Vertse.

The Institute's research covers ecological, faunistical, and taxonomical research from the point of view of nature conservation and economy of Hungarian bird life.

Publications: Aquila, a Madártani Intézet évkönyve (Aquila, Yearbook of the Hungarian Institute of Ornithology).

MAGYAR ÁLLAMI EÖTVÖS LORÁND GEOFIZIKAI INTÉZET

Hungarian Geophysical Institute "Roland Eötvös".

Address: Budapest XIV., Columbus u. 17—23.

Director: Pál Müller, Ph. D.

The main interests of the institute lie in the areas of gravitational, magnetic, geoelectric and seismic investigations. Well-logging instrumentation and methods for investigating geophysical phenomena are being dealt with both in laboratory and in field.

The Institute runs an Observatory in Tihany for gathering data on the temporal variations of the terrestrial magnetic and gravitational field and telluric currents. Records and tabulated data are being sent to the World Data Center.

Publications: Geofizikai Közlemények (Geophysical Transactions). A Magyar Állami Eötvös Loránd

Geofizikai Intézet Földmágneses Évkönyve (Annals for the Magnetic Observatory Recordings of the Hungarian Geophysical Institute "Loránd Eötvös").
A Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet Évi Jelentése (Annual Report of the Hungarian Geophysical Institute "Loránd Eötvös").

MAGYAR ÁLLAMI FÖLDTANI INTÉZET

Hungarian Geological Institute.

Address: Budapest XIV., Népstadion út 14.

Director: József Konda, D. Sc.

The task of the Institute includes the geological mapping of the regions of Hungary, the improvement of the various kinds of analysis of geological materials, and the development of research methods.

The Institute has a co-operative program which covers the preparation of international maps such as geologic, palaeogeographic, tectonic, neotectonic, Quarternary, hydrogeologic, engineering-geologic, and metallogenic maps.

Physical and physico-chemical methods are widely applied. Particularly noteworthy among these are X-ray diffractometry, X-ray fluorescence spectroscopy, optical spectrography, and absorption spectrophotometry. In addition, engineering geological research methods are being developed.

Special services of the Institute include the geological museum, the national geological archives, a library and collection of maps, and the sedimentary-petrographic, chemical, geochemical, and palaeontological laboratories. Year of founding, 1869.

Publications: Évi Jelentés (Annual Report), Évkönyv (Yearbook), *Geologica Hungarica* a) Series Geologica; b) Series Paleontologica.

MAGYAR ÁSVÁNYOLAJ ÉS FÖLDGÁZ KÍSÉRLETI INTÉZET (MÁFKI)

Hungarian Oil and Gas Research Institute (MÁFKI).

Address: Veszprém, Wartha Vince u. 1.

Director: Dr. Rezső Csikós.

Scientific and technical problems of petroleum and natural gas processing and petrochemistry. Collaboration in plant design and development of production technology in these fields. Design and manufacture of special laboratory assemblies and pilot plants. Preparation of special products and special chemicals. Development and application of analytical and other testing methods for hydrocarbons, hydrocarbon derivatives and blends. Documentation service regarding the mentioned lines of activity. Collaboration in the formulation of standards in connection with the products of these industries.

In the fields of activity listed below, the Institute has at its disposal a stock of information and experience published at home and abroad, as well as numerous patents. Research, production and supply commissions are readily accepted.

Solvent technology for lubricating oils, paraffin wax technology, asphalt technology, preparation of lubricating greases, vaselines, production of electrical insulating liquids and materials, quality development of motor fuels, motor oils and transmission oils, Development of additives, Production of oxo alcohols and plasticizers, production of synthetic detergents, production of acetylene, ethylene, acetone, ethylene oxide, research in cracking and pyrolysis problems, production of normal hydrocarbons, research in catalysis and catalysts, rheological investigations, investigation of the structure of complex mixtures, mathematical modelling.

Publications: Magyar Ásványolaj és Földgáz Kísérleti Intézet Kiadványai (Publications of the Hungarian Oil and Gas Research Institute), monographic series.

MAGYAR TEJGAZDASÁGI KÍSÉRLETI INTÉZET

Hungarian Dairy Research Institute.

Address: Mosonmagyaróvár, Lucsony u. 24.

Director: dr. Ferenc Ketting.

The Institute carries on basic and applied research work in the fields of physics, chemistry, microbiology, hygiene, technology, machinery, and industrial economy, as they relate to dairy in-

terest. Further tasks of the Institute are as follows: raising dairy microbe strains and preparing pure cultures, testing and evaluating dairy machines and equipment, offering expert evidence and advice and providing library service.

Publications: Tejipari Kutatási Közlemények (Dairy Research Communications), once or twice a year.

MÉRÉSTECHNIKAI KÖZPONTI KUTATÓ LABORATÓRIUM

Central Measurement Research Laboratory.

Address: Budapest 5, POB. 205.

Director: Assoc. Prof. György *Striker*, C. Sc.

The literature describes a device developed at the Laboratory for processing output data from instruments registering revolutions or numbers of units. A transistorized digital dataprocessing multiplying unit for measurement purpose is also reported in detail. A noncontacting surface thermometer has been developed, too. A patent has been granted to the Laboratory for a process and apparatus for the contactless measurement of torsional stresses by magnetoelastic means on rotating test specimens.

Patents were also obtained for components of electronic weighing systems, such as load-cells, and a novel indicator, "Tensicomp", comprising an electronic potentiometer using strain gauges instead of slide-wire.

Published articles indicate interest in local similarity of perturbed thermal fields as well as heat-transfer problems in industrial thermometry, electromechanical data display devices, development trends in semiconductor-type direct to alternating current converters industrial applications of operational units based on computing techniques, and studies on the reliability of transistorized amplifiers. Other articles and patents reveal advances in the theory and construction of turbine-type flowmeters, instruments for density measurement, on-line optical and electrochemical analytical instruments, and colour measurement.

NÖVÉNYVÉDELMI KUTATÓ INTÉZET

Hungarian Research Institute for Plant Protection.

Address: Budapest II., Herman O. út 15.

Director: Tibor *Jermly*, C. Sc.

Deputy Director: Ödön *Szatala*, C. Sc., László *Vajna*.

The Institute conducts research on plant pathology, pathophysiology, entomology, weed research, chemistry of pesticides and economy of plant protection. It has a library of 7,200 volumes. Founded in 1880, it was reorganized in 1950.

Publications: Növényvédelmi Kutató Intézet Évkönyve (Annales Instituti Protectionis Plantarum Hungarici).

ORSZÁGOS AGROBOTANIKAI INTÉZET

National Institute of Agrobotany.

Address: Tápiószéle.

Director: Prof. Dr. A. *Jánossy*, Corresponding member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute has been concerned with investigations of agrobotany; its main task being the production and introduction of primary plant material for plant breeding purposes.

Activities in the Institute have been primarily directed towards broadening, maintaining and investigating of world assortments of cultivated living plants for supplying the plant breeders with information and seed of primary plant materials. To achieve that aim, there have been performed investigations of phytochemistry, biometry, plant physiology, pathology and taxonomy as well as plant ecology on the cultivated plant varieties.

ORSZÁGOS ÉLELMEZÉS- ÉS TÁPLÁLKOZÁSTUDOMÁNYI INTÉZET

Institute of Nutrition.

Address: Budapest IX., Gyáli út 3/a.

Director: Prof. Róbert *Tarján*, D. M. Sc.

Deputy Director: Károly *Lindner*, C. Sc.

The Institute is engaged in studies of the nutritional status of different groups of the population and in research on the influence of various nutritional factors of health. Further responsibilities of the Institute are:

Compilation and edition of the Hungarian Food Composition Tables, investigation of food additives, pesticide residues, radioactive fall-out and other contaminants in foods, recommendations on pesticide residue tolerances, development of methods for the detection and determination of all kinds of extraneous substances in foods, development of microbiological standards, investigation and supervision of medical food preparations, dietetic foods, vitamin enriched, and imported foods, as well as cosmetics, registration of medical food preparations, vitamin enriched and dietetic foods, biological evaluation of modern cooking methods.

ORSZÁGOS FRÉDÉRIC JOLIOT-CURIE
SUGÁRBIOLÓGIAI ÉS SUGÁREGÉSZSÉGÜGYI KUTATÓ INTÉZET

Frédéric Joliot-Curie National Research Institute for Radiobiology and Radiohygiene.

Address: Budapest XXII., Budafok, Pentz K. u. 5.

Director: Vilmos *Várterész*, C. Sc.

The Institute acts as a basic research establishment investigating the biological effects of ionizing radiations as well as a policy making organ of radiation hygiene in Hungary. Experiments are performed to study the effect of radiation on the system of biological immunity. The possibility of modifying radiosensitivity by chemical and biological means is also under investigation. Moreover it makes efforts for the practical use of ionizing radiations in the field of biology and medicine.

Research results have been reported in both Hungarian and foreign journals.

ORSZÁGOS GYÓGYSZERÉSZETI INTÉZET

State Institute for Pharmacy.

Address: Budapest XIV., Úzsoki u., 36/a,

Director: Gábor *Vastagh*, D. Sc.

The Institute is the main control organ of pharmaceuticals, including investigation of new analytical methods of medicaments, investigation of preparative technology of medication forms and their biopharmaceutical action. The Institute maintains an up-to-date documentation and documentary service on Pharmacy and Drug Therapy.

Publications: *Gyógyszereink* (Our Medicaments) m. *Gyógyszerészeti és Gyógyyszerterápiás Dokumentációs Szemle* (Literary Review on Pharmacy and Drug Therapy) Bibliographical data from about 140 periodicals, titles in Hungarian and the original languages.

ORSZÁGOS KÖZEGÉSZSÉGÜGYI INTÉZET

National Institute of Public Health.

Address: Budapest IX., Gyáli út 2/6.

Director: Prof. Tibor *Bakács*, D. Sc.

The National Institute of Public Health has been active in both basic and applied research on hygiene and epidemiology. In the field of sanitary engineering, its activities range from soil sanitation to studies on the pathophysiological factors in the environment. The departments of microbiology, immunology, and epidemiology study microorganisms indigenous to man and produce (and control) vaccines for the prevention of infectious diseases.

The Institute is responsible for the postgraduate teaching of public health and epidemiology.

Publications: Annual Report of the Activities.

ORSZÁGOS METEOROLÓGIAI SZOLGÁLAT

Meteorological Service of the Hungarian People's Republic.

Address: Budapest II., Kitaibel Pál u. 1.

President: Prof. Frigyes Dési, D. Sc.

In the different institutes of the Service (Central Institute of Meteorology, Central Forecasting Institute, Central Institute of Atmospheric Physics both basic and applied meteorological research works are being carried on. The peculiarities of the weather and climate of the country and the surrounding territories are being investigated from their mesosynoptic and climatological aspects. The main fields of research cover mesosynoptic investigations on the formation of excessive precipitation and dry spells, development of storms and thunderstorms; problems of numerical weather forecasting and long-range weather forecasts for Hungary; investigation of cloud pictures and radiation measurements obtained by meteorological satellites, their use in different researches; aeroclimatological investigations, radiation balance, components of heat- and water-balance in Hungary; agrometeorological problems of the productions of field crops, horticulture, grape and fruit production; biometeorological problems of urban and industrial areas, and investigations on the turbulence diffusion with special regard to the propagation of air pollutants. On the basis of information-theory, research is carried out on problems of rational density of station network. In the field of atmospheric physics the characteristics of aerosols, the radioactivity in the air and precipitation and the variations of the ionosphere are studied. Investigations on instrument construction are focussed on microclimatological instruments, spheric devices, and lightning counters.

Research work is advanced by the observatories situated in different parts of the country, one observatory for aerology and atmospheric physics, one observatory for radiosonde ascents, three agrometeorological observatories, one storm warning observatory, and one observatory for research on the ionosphere.

Founded in 1870. the Service has a staff of 400, including 110 qualified meteorologists.

Publications: Időjárás (Weather). bm. (E, F, G, H, R; g or r).

Légkör (Atmosphere). q. (H).

Időjárás Napi Jelentés (Daily Weather Report).

Időjárás Havi Jelentés Magyarországról (Monthly Weather Report of Hungary).

Agrometeorológiai Tájékoztató (Agrometeorological Bulletin).

Országos Meteorológiai Szolgálat Központi Meteorológiai Intézete Évkönyvei, 1. rész: Talajközeli megfigyelések, 2. rész: Magaslégköri megfigyelések, 3. rész: Éghajlati adatok.

(Year-Books of the Central Institute of Meteorology of the Meteorological Service of the Hungarian People's Republic, Part. 1. Surface Observations, Part 2. Upper-Air Observations, Part 3. Climatological Data.)

Ionoszféra Jelentés (Ionospheric Data).

Beszámoló Tudományos Kutatásokról az Országos Meteorológiai Intézet Hivatalos Kiadványai c. sorozatban (Reports on Scientific Researches in the series Official Publications of the Central Institute of Meteorology).

Magyarország éghajlata (The Climate of Hungary).

ORSZÁGOS MUNKAEGÉSZSÉGÜGYI INTÉZET

State Institute of Occupational Health.

Address: Budapest IX., Nagyvárad tér 2.

Professor: Prof. Miklós Timár, C. Sc.

The Institute is engaged in the study of the pathogenesis and therapy of occupational diseases with emphasis on the etiology and therapy of pneumoconioses. An experimental toxicological study of the occupational hazards of agricultural and chemical substances is being carried out.

Many factors influencing the health and well being of industrial workers and their job placement are being investigated, e.g., the effects of exposure to noise, physical and nervous strain as related to efficiency, and studies on exposure.

The Institute provides special guidance for regional industrial institutions and serves as the consultant for the Ministry of Health and the Occupational Hygiene Department of the Medical Postgraduate Institute.

Publications: Munkavédelem (Occupational Safety and Health).

ORSZÁGOS ONKOLÓGIAI INTÉZET

National Cancer Research Institute
Budapest XII., Ráth Gy. u. 7.
Director: S. *Eckhardt*, D. Sc.

The Institute is the centre of the diagnostical, therapeutical and follow-up activities in the fight against malignant diseases. It is heading the Hungarian Cancer Network, dealing with methods of early detection, clinical, resp. radiological and histological diagnosis, the methods of surgical, radiological and chemotherapeutical treatment of all kinds of malignant tumours. The Institute's duty is to model new methods in the field of surgery, radiotherapy and chemotherapy. The diagnostical as well the therapeutical management of the malignant tumours are considered as team work, that means the close cooperation of all branches interested in the cancer therapy. For this reasons all new patients have to come to the Central Consultation Committee, which makes the decision on the therapeutical plan.

In its clinical research work the Institute deals particularly with the diagnostical problems, surgical and radiological therapy of tumours of the breast, with the combined surgical-radiological treatment of the uterine cancer, with the combined radiological-chemotherapeutical treatment of malignant lymphomas and leukaemias, with the physics, dosimetry and biology of ultrahard X-rays (Betatron) and isotope treatment (Telegamma therapy). Many isotopes take part in the routine diagnostical and therapeutical work: I—131, Sr—85, P—32, Au—198, Y—90, etc.

Within the scope of the Institute works the Chair of Oncoradiology (Director: Prof. I. Rodé), which is member of the Postgraduate Medical Institute and is responsible for the physical, biological and clinical research in the field of Oncoradiology.

The National Cancer Research Institute is the Centre of the Hungarian Cancer Society and publishing quarterly: *Magyar Onkológia*.

ORSZÁGOS RÖNTGEN ÉS SUGÁRFIZIKAI INTÉZET

National Institute for Roentgenology and Radiation Physics.
Address: Budapest VIII., Kállai É. u. 20.
Director: Prof. Mihály *Erdélyi*, C. Sc.

Deputy Director: Dr. György *Csákány*, C. Sc.

The Institute is conducting studies on roentgenological practices. The activities comprise research and developing works on the field of the radiological instruments and equipments and the qualification of the X-ray equipments and materials produced by the industry and development of methods for their use.

Publications: *Radiológiai Közlemények* (Radiological Proceedings).

ORSZÁGOS TESTNEVELÉS- ÉS SPORTEGÉSZSÉGÜGYI INTÉZET

National Medical Institute of Physical Education and Sport.
Address: Budapest XII., Alkotás u. 48.
Director: Peter *Kálmán*, M. D., M. A., F. A. C. C.

The Institute investigates the level, developmental process, change of level and variability of physical fitness and performance of the human organism in sport activity.

The main fields of interest in research are cardiorespiratory functions, biochemistry (acid-base equilibrium, stored energy, rate of mobilizing energy sources and so on), and neurophysiology (neuropsychology).

Investigation is extended to problems of age groups (puberty, adolescence, adulthood, advanced age), sex (feminine performance and so on), the status of training and health (athlete and normal individual in health and in disease) and includes the aspects of both diagnostics and therapy (guidance, medical gymnastics, rehabilitation).

POSTA KÍSÉRLETI INTÉZET

Research Institute of the Hungarian Post Office.
Address: Budapest IX., Zombori u. 2.
Director: Tibor *Rontó*.

Papers issued by the Institute deal with questions of the communication systems, with quality control of equipment, apparatus and cables to be employed for postal networks, testing of new materials, and studies on new measuring methods. The Institute also deals with the problems of automation of the postal services.

RÉPATERMESZTÉSI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Beet Culture.

Address: Sopronhorpács, County Győr-Sopron.

Director: Manó *Shmillár* Dr.

The Institute is engaged in breeding work on sugar and fodder beets, cichory for root winter barley, flay and vetches. Research is directed toward particular forms of the species above, e.g., genetically monogern, polyploid, and male sterile beets and their breeding for resistance to diseases. Plant pathology, pollen and germination biology, and the biochemistry and physiology of beets are also under investigation.

Publications: Répatermesztési Kutató Intézet Közleményei, Sopronhorpács (Bulletin of the Research Institute for Beet Culture in Sopronhorpács).

SZŐLÉSZETI ÉS BORÁSZATI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Viticulture and Oenology.

Address: Budapest II., Herman Ottó út 15.

Director: József *Katona*.

Among the most important tasks of the Institute are: the amelioration and establishment of new grapevine varieties; the application of organic and inorganic fertilizers; and the development of irrigation and protection of the soil. Other important tasks of the Institute are: working out of modern protecting treatments against the diseases and pests of the vines, as well as ameliorating the quality of wines; the examination of organization problems of grape and wineproduction; basic research of grape production and oenology; and the mechanization of grape production and wine making.

Publications: Országos Szőlészeti és Borászati Kutató Intézet Évkönyve (Yearbook of the Research Institute for Viticulture and Oenology).

Szőlő- és Gyümölcsstermesztés (Grape and Fruit Production).

TÁVKÖZLÉSI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Telecommunication.

Address: Budapest II., Gábor Áron u. 65.

Director: Dr. Imre *Váradi*.

To the topics of the Institute pertain the study of problems in system theory and design to the purpose of further development of wire-bound and microwave radio equipments, — fundamental research, primarily the elaboration of the fundamentals of system engineering for point-to-point communication links, — development of new professional long-haul microwave equipments, — conception of fundamental design and application methods of integrated communication networks, — development of new solid-state devices, circuits and component parts, — elaboration of special measuring instruments for microwave and communication equipments.

VASÚTI TUDOMÁNYOS KUTATÓ INTÉZET

Railway Scientific Research Institute.

Address: Budapest VIII., Múzeum u. 11.

Director: József *Nagy*, C. Sc.

The Institute is studying the problems of railway communication, particularly its technical and economic aspects. The scope of its duties includes the investigation of possible adaption of radio-active isotopes in the field of communication.

Publications: Vasúti Tudományos Kutató Intézet Évkönyve (Yearbook of the Railway Scientific Research Institute).

VILLAMOS AUTOMATIKA INTÉZET

Institute for Electrical Automation.

Address: Budapest I., Krisztina krt. 55.

Director: Béla *Landgraf*.

The Institute does research, projecting and production in the field of electric drive-control, process control, computer technique, numeric control, telemetering and other automations, mainly for applications in the industry, in smaller part for the traffic and for commercial, agricultural etc. purposes.

VÍZGAZDÁLKODÁSI TUDOMÁNYOS KUTATÓ INTÉZET (VITUKI)

Research Institute for Water Resources Development.

Address: Budapest VIII., Rákóczi út 41.

Director: Károly *Stelczer*, C. Sc.

The Institute's activities range over many branches of hydrology and hydraulics. Research efforts are directed toward investigation of regularities in the variations of ground water level, determination of the factors affecting surface drainage, hydrological questions of river channelling, sediment movement, silt formation in reservoirs, relationship between meteorological factors and the ground water level, scientific questions of river training and techniques for small-scale model experimentation.

Publications: Vízrajzi Évkönyv (Hydrological Yearbook). Magyarország Hidrológiai Atlasza (Hydrological Atlas of Hungary) Atlases in Series. Vízügyi Közlemények (Hydraulic Engineering). Beszámoló a Vízgazdálkodási Tudományos Kutató Intézet Munkásságáról (Report on the Activities of the Research Institute for Water Resources Development). VITUKI Tanulmányok és Kutatási Eredmények (Research Institute for Water Resources Development. Studies and Research Results). Series in Hungarian. Transactions in foreign languages. Időszerű Öntözési Kutatások (Irrigation Research).

IPARI KUTATÓ INTÉZETEK

TECHNICAL RESEARCH INSTITUTES

BŐR-, MŰBŐR-, CIPŐIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute of Leather, Artificial Leather and Shoe Industry.

Address: Budapest IV., Paksi József u. 43.

Director: Iván Lóránt, D. Sc.

The Institute serves as the scientific and technical research centre for the leather, artificial leather, shoe and allied industries and deals with every problem concerning these industries. The Leather Department develops new leather manufacturing techniques and applications for new auxiliary agents. In the Auxiliary Materials Department research is directed to the development of new tanning materials and auxiliary products and to the investigation of their properties. The Synthetic Leather substitutes including synthetic leather, deals with synthetic materials and their application in the shoe industry. The Shoe Department is engaged in developing new production techniques. Emphasis is placed upon the problems of manufacturing of cemented shoes and prefabrication, on foot hygiene, and the standardization of shoes. The purpose of the Quality Control and Testing Department is to develop new chemical and physical methods for testing leather, artificial leather, shoes, furs, etc. It is responsible for evaluating quality. The isotope-laboratory uses his special technique in the research work of different departments of the Institute. The big advantage of the Institute is his verticality, beginning with the raw material and ending with products for customers use. This enables to connect the result of scientific research work with the needs of the practical application.

CUKORIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for the Hungarian Sugar Industry.

Address: Budapest VIII., Tolnai Lajos u. 25.

Director: András Zsigmond.

The areas of scientific exploration at the Institute cover sugar beet production and beet sugar manufacturing technology ranging from the chemical, microbiological, mechanical, and thermo-energetic aspects to the automation of the technological processes. Studies reported in the literature are concerned with the chemical and physical properties of the sugar beet (field trials), the theory and practice of beet sugar factory diffusion processes, sugar decomposition in different media, juice purification (traditional and ion exchange), etc.

Publications: Cukoripari Kutatóintézet Közleményei (Communications of the Sugar Industry Research Institute).

ERJEDÉSIIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute of the Fermentation Industry.

Address: Budapest II., Herman O. u. 15.

Director: Dr. Antal Pele, C. Sc.

The Institute's research covers not only fermentation processes but also economic aspects of the industry. An economic feasibility study on the production and industrial processing of sorghum was reported recently.

The scope of investigative work includes the following areas: laboratory equipment for the continuous fermentation of spirits from molasses; production of crystalline citric acid by means of ion exchange; and the metabolic role of oligosaccharides in alcoholic fermentation by yeasts.

Publications: Erjedésiipari Kutató Intézet Közleményei (Communications of the Research Institute of the Fermentation Industry).

FAIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for the Wood Industry.

Address: Budapest XX., Vörösmarty u. 56. .

Director: Kálmán Strobl.

The Institute's activities include research on problems of the primary and secondary wood working industry (timber, plywood, veneer, panels, fibre-board, chipboard, joinery for the building industry, industry for sporting goods etc.) concerning the technological, anatomical, chemical, wood preservation, production, mechanization, automation aspect of the mechanical and chemical and the problems of economies in these fields just as well.

The Institute carries on research work to investigate the possibilities to make use of wood in a more economical way in the field of furniture industry, agriculture, building industry and joinery for the building industry.

FÉMIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Non-Ferrous Metals.

Address: Budapest XI., Fehérvári út 144.

Director: János Zúmbó, C. Sc.

The Institute is conducting research pertinent to the alumina and aluminum industries as well as to the production and refining of certain economically recoverable less-common metals. Investigative work covers all stages of alumina and aluminum production from the processing of bauxite ores through the manufacture of semifinished and finished wrought aluminum products.

Other areas of activity are corrosion problems, surface treatment of metals, development of new analytical methods and the use of radioisotopes as a research tool.

Publications: Fémipari Kutató Intézet Közleményei (Proceedings of the Research Institute for Non-Ferrous Metals, Hungary).

HÍRADÁSTECHNIKAI IPARI KUTATÓ INTÉZET "HIKI"

Industrial Research Institute for Electronics "HIKI". (Formerly: Industrial Research Institute for Telecommunications.)

Address of Headquarters: Budapest VI., Vörösmarty u. 67.

Director: Aurel Komporday, M. Eng.

The main activity of the Institute is the research and development of electronic components and microcircuits (monolithic and hybrid).

Scientific workers of HIKI have done outstanding work on the investigation of physico-chemical problems of microcircuits, semiconductor devices (including optoelectronic devices) and other electronic components. They have elaborated manufacturing technologies and special equipments used thereby.

A great deal of works presents their results on material and functional research on semiconductors, germanium and silicon crystals, thin and thick films, oxide ceramics and electron beam technique.

In the area of electronic engineering the Institute is dealing with the testing methods of electrical characteristics (including reliability and life expectancy) of active and passive electronic components and microcircuits. A line of testing equipments has been developed for this purpose as well as measuring devices for research and development and manufacturing of electronic components.

Publications: Híradástechnikai Ipari Kutató Intézet Közleményei (HIKI Communications).

KONZERV- ÉS PAPRIKAIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Canning Industry and Paprika Manufacture.

Address: Budapest IX., Földvári u. 4.

Director: Szilveszter Török, D. Sc.

The Institute's main activities in the preserving industry are the following: questions of the suitability of raw materials, technological, technical, instrumentational, automational, product

development, packing, analytical, microbiological and economical problems which are the subjects of scientific research and of development. The institute cooperates in the practical application and distribution of the results. It also fulfills certain technical designing activity and advisory functions which are directly relevant to factories operating under the auspices of Konzervipari Tröszt (Trust of the Canning Industry). The Institute's function also covers technical measurement and gives expert opinion of small series and nonseries, machines and equipments of the canning industry.

KÖZPONTI ÉLELMISZERIPARI KUTATÓ INTÉZET

Central Food Research Institute.

Address: Budapest II., Herman O. u. 15.

Director: Prof. K. Vas, corr. member of the Hungarian Academy of Sciences.

The Institute consists of the departments of chemistry, enzymology, microbiology, instrumentation and automation, unit operations, technology, industrialeconomics and planning, documentation, as well as of the sections of protein technology and of fundamental food chemistry. The total staff of 210 includes 59 graduates trained in chemistry, physics, mechanical engineering, biology, agriculture and economics, resp. Some of the main research projects are as follows: production and use of food enzymes, production of microbial protein, preservation of food by chemical and physical methods (including irradiation), study of chemical changes occurring during storage and preservation of food, instrumentation and automation in food manufacture, methodology of quality control, development of new methods of food analysis, planning of research and development in food manufacture.

Publications: Élelmiszertudomány (Food Science)

MŰANYAGIPARI KUTATÓ INTÉZET

Plastics Research Institute.

Address: Budapest XIV., Hungária krt. 114.

Director: Gyula Hardy, C. Sc.

The following studies comprise the main activity of the Institute: analysis of monomers and polymers; synthesis of different polymerization catalysts; polymerization processes; and the casting, moulding, extrusion, and lamination of polymers. The published chemical literature includes papers on the preparation of alkylaluminum halides; problems of the mechanism of stereospecific polymerization and copolymerization; polymerization in solid phase; questions of the mechanism of caprolactam polymerization; grafting of several monomers onto foils and fibers; determination of the influencing fibers; problems of fiber formation and fine structure investigations of the same; determination of molecular weight of polymers by different methods; thermal analysis of polyester resins and other polymers, such as polypropylene and epoxide resins; the influence of several glycols on the polycondensation reaction with maleic anhydride and fumaric acid; problems on compounding different polymers; determination of the electric behaviour of polymers and questions of polymeric semiconductors; and problems of aging and the stabilization of polymers.

MŰSZERIPARI KUTATÓ INTÉZET

Hungarian Measuring Instrument Research Institute.

Address: Budapest XIII., Véső u. 3. POB. 183, Budapest 5.

Director: István Böhm.

The chief activities of the Institute include research and development of automatic components, as well as research, design and application of electronic measuring apparatus for telecommunication, medical and other purposes. In addition, the Institute is carrying on research work in the field of protective relays, development work on certain electromechanical parts, and research serving as basis for these developments.

Publications: Műszeripari Kutató Intézet Közleményei (Bulletin of the Hungarian Measuring Instrument Research Institute).

NÖVÉNYOLAJ ÉS MOSÓSZERIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Vegetable Oil and Detergent Industry.

Address: Budapest X., Maglódi út 6.

Director: *Kurucz Józsefné* dr.

Research at the Institute is concerned with the development of analytical methods and technological procedures for the Hungarian vegetable oil — and detergent industry.

Publications: Növényolaj- és Mosószertipari Kutató Intézet Közleményei (Communications of the Research Institute for Vegetable Oil and Detergent Industry).

ORSZÁGOS GUMIIPARI VÁLLALAT FEJLESZTŐ ÉS KUTATÓ INTÉZETE

Rubber Research Institute of the United Hungarian Rubber Factories.

Address: Budapest VIII., Kerepesi út 17.

Director: *Zoltán Bartha*, C. Sc.

The Institute conducts research on the chemistry and technology of rubber. Investigations include improvement of test methods, general compounding problems, textilerubber and metal-rubber systems, and the manufacture of tyres and dubber products. Studies have been made on the viscoelastic behavior of high polymers, the swelling mechanism of rubber, and the determination of shear modulus in cured conditions and curing the crosslinking process, the mechanics of the highly-deformable and textilerubber systems, the solution of the differential equation of the non-stationary thermal conductivity for thick rubber products.

ORSZÁGOS HÚSIPARI KUTATÓ INTÉZET

Hungarian Meat Research Institute.

Address: Budapest IX., Gubacsi út 6/b.

Director: *Zoltán Tomán*.

The Institute conducts basic and applied research in the fields of biochemistry, technology, engineering, and economics.

Established in 1959, the Institute is directly responsible to the Trust for Livestock Trade and Meat Industry and is subject to the Ministry of Agriculture and Food. In 1970, its staff numbered 139, of which 30 were graduate research workers.

Publications: Az Országos Húsipari Kutatóintézet Évkönyve (Yearbook of the Hungarian Meat Research Institute).

PAPÍRIPARI KUTATÓ ÉS FEJLESZTŐ INTÉZET

Paper Research and Development Institute.

Address: Budapest XXI., Duna u. 57.

Director: *György Vámos*, C. Sc.

Research at the Institute in the area of pulping is concerned with studies on new raw materials, e.g., straw or deciduous woods, and the development of new pulping processes. Problems under investigation in paper making include the use of short fibered pulps, converting of paper and board, and the theory and practice of paper dryxing. Instrumentation, quality control, new testing methods and economic problems of the paper industry are areas of interest. The library, the documentation and technical information services are basic information sources for the Hungarian paper industry.

Publications: A Papíripari Vállalat Kutató- és Fejlesztőintézetének Közleményei (Publications of the Paper Research and Development Institute). A Papíripari Vállalat Központi Műszaki Könyvtárának Közleményei (Accessions List of the Central Paper Technical Library). Külföldi Folyóiratok Tartalma. Papíripar. (Contents of Foreign Trade Journals. Paper Industry.)

SÜTŐIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for the Baking Industry.

Address: Budapest XI., Dombóvári út 5—7.

Director: *Lajos Szalai*, C. Sc.

The research activity of the Institute is directed toward the development of the Hungarian baking industry. In addition to the chemical, microbial, technological, and technical aspects of research, the Institute also deals with the quality assessment of the raw materials and end products of the baking industry. The Institute directs the countrywide laboratory network and gives expert consulting.

SZERVES VEGYIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for the Organic Chemicals Industry.

Address: Budapest VIII., Stáhly u. 13.

Director: István Koczor, C. Sc.

The Institute studies chemical process principles, unit operations and their application in industrial practice, specifically in the elaboration of technologies together with analyses, control methods, and automation, to be used in the manufacture of organic chemicals.

Thus it does some research in applied physics, viz. in the domain of surface activity, adsorption phenomena, crystallization, phase equilibria, dielectric properties, and also in electronics as far as this branch is involved in the design and construction of apparatus for the measurement and control of chemical process parameters.

SZILIKÁTIPARI KÖZPONTI KUTATÓ ÉS TERVEZŐ INTÉZET (SZIKKTI)

Central Research and Design Institute for Silicate Industry.

Address: Budapest 3, P. O. Box 112.

Director: Prof. József Talabér, C. Sc.

This Institute is the base institution of silicate (building material) research in Hungary.

Its triple field of activity includes research, design and investment.

Tasks: Basic research in silicate chemistry; development of mechanization and automation; research, development and introduction of new raw materials and new technologies; proposals for exports and imports of industrial plants; development of new engineering methods for the reduction of power consumption; research to reduce sanitary hazards in the silicate industry; publication of research and development of the Institute.

TEXTILIPARI KUTATÓ INTÉZET

Textile Industry Research Institute.

Address: Budapest X., Gyömrői út 86.

Director: dr. Mihály Ekés.

The main concern of the Institute is to establish up-to-date processes in spinning, weaving, and knitting technology and to apply the most modern production methods in the garment industry. In addition diversified and intensive research work is being carried out concerning the physico-chemical properties and structural characteristics of natural and synthetic fibers, yarns, and fabrics.

Methods and investigative procedures are established and instruments are designed for experimental and industrial use with regard to the rheological and electrostatic properties of fibers, the resistance of yarns against repeated stress and fatigue, the abrasion and crease resistance of fabrics, the quantitative determination of fatty alcohol derivatives, etc.

Extensive research is undertaken to study surface active agents, dyes, and auxiliary products, to investigate the theory of stress-distribution and to compute the irregularities of textile products.

Experimental control equipment and instruments are designed for fabric research, for scientific and industrial purposes, and for automation.

Publications: Textilipari Kutató Intézet Közleményei (Communications of the Textile Industry Research Institute.)

VASIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute for Ferrous Metallurgy.

Address: Budapest XI., Fehérvári út 130.

Director: József Verő, member of the Hungarian Academy of Sciences.

The main purpose of the Institute is to carry out research concerning industrial developments in ferrous metallurgy, e.g. the direct reduction processes of iron ores, refinements of the primary structure of high-speed steels, investigations of cold workability of steel, stress measurements on casting, and the determinations of steel and ore compositions by means of a new chemical technique based on the heat of reaction.

Publications: Vasipari Kutató Intézet Évkönyve (Yearbook, 1963, 1965, 1967 and 1969 Including Scientific Works of the Institute for the Last Ten Years).

VILLAMOSENERGIA-IPARI KUTATÓ INTÉZET (VEIKI)

Institute for Electrical Power Research.

Address: Budapest V., Zrínyi u. 1.

Director: György *Vajda*, D. Sc.

As the central research institute of the Hungarian electric power industry, VEIKI has the task of solving manifold scientific problems in connection with the operation and development of power stations and networks. Theoretical and experimental studies and development works are carried out in the field of combustion techniques, heat exchange, power plant chemistry, automation and control engineering, protection and reliability of power systems, high voltage and high power techniques, operation research, mathematical logics. The Institute's modern electric laboratories include facilities for high voltage testing up to 500 kV and short-circuit testing up to 1380 MVA. A high-speed digital computer of type RAZDAN—3 serves for both scientific and data-processing purposes. Special research stations for oil and gas combustion, pulverized-fuel combustion and coal mill experiments are also available.

Publications: Villamosenergiaipari Kutató Intézet Közleményei (Publications of the Institute for Electrical Power Research) (not regularly issued, for the time being).

VILLAMOSIPARI KUTATÓ INTÉZET

Research Institute of Electrical Industry.

Address: Budapest XV., Cservenska Miklós út 86.

Director: Dr. József *Lukács*, D. Sc.

Research studies are related to insulating materials, semiconductor elements, electrical apparatus, industrial electronics, automation and control, and advanced methods of generating and transforming electrical energy.

A IUPAP HÍREI

Az 1972-es IUPAP konferenciák

Commission on Thermodynamics and Statistical Mechanics

1. Centenary of the Boltzmann Equation "C" Vienna Summer/
AUSTRIA Autumn

inf.: Prof. Dr. P. MAZUR
Secretary of the Commission
Instituut-Lorentz voor
Theoretische Natuurkunde
Nieuwsteeg 18
Leiden, NETHERLANDS.

Commission on Very Low Temperatures

2. XIII Int. Conf. on Low Temperatures Physics "A" Boulder Aug. 20—26
Col., USA

inf.: Dr. R. H. KROPSCHOT
Cryogenics Division
National Bureau of Standards
Boulder, Colorado 80302, USA.

Commission on Semiconductors

3. 11th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors "A" Warsaw July 25—29
POLAND

inf.: Prof. SOSNOWSKI
Institute of Physics
The Polish Academy of Science
Warsaw, POLAND.

4. Radiation Induced Defects in Semiconductors "B" Reading July 19—21
UK

inf.: Prof. E. W. J. MITCHELL
J. J. Thomson Physical Laboratory
Whiteknights
Reading, RG6 2AF, UNITED KINGDOM.

Commission on Magnetism

5. Symposium on the Physics of Dense Matter "C" Copenhagen
DENMARK

inf.: Dr. C. DeJAGER
The Astronomical Institute
21 Beneluxlaan
Utrecht, NETHERLANDS.
(Co-sponsored by IAU)

Commission on Solid State Physics

6. Int. Conf. on Thin Films "B" Venice May 15—19
ITALY

inf.: Dr. K. H. BEHRNDT
Granville-Phillips Corporation

5675 East Avapahre Avenue
Boulder, Colorado 80 303, USA.

(Also sponsored by the ICO)

- | | | | |
|--|-----|-------------------------|------------|
| 7. 2nd Int. Conf. on Vapour Growth and Epitaxy | "B" | Jerusalem
ISRAEL | May 22—25 |
| inf.: Prof. M. SCHIEBER
Department of Physics
The Hebrew University
Jerusalem, ISRAEL. | | | |
| 8. 2nd Int. Symposium on Surface Physics | "B" | Enschede
NETHERLANDS | June 22—23 |
| inf.: Dr. A. van SILFHOVT
Technische Hogeschool Rwwente
Afd. Technische Natuurkunde
Postbus 217
Enschede, NETHERLANDS. | | | |
| 9. Int. Conf. on Band Structure in Solids | "B" | Exeter
UK | July 3—5 |
| inf.: Prof. E. P. WOHEFARTH
Department of Mathematics
Imperial College
Exhibition Road
London S. W. 7, UNITED KINGDOM. | | | |
| 10. 7th Int. Symp. on the Reactivity of Solids | "B" | Bristol
UK | July 17—21 |
| inf.: Prof. J. S. ANDERSON
Morganic Chemistry Laboratory
University of Oxford
South Parks Road
Oxford OX1 3OR, UNITED KINGDOM. | | | |
| (Co-sponsored by IUPAC) | | | |
| 11. 2nd Int. Conf. on the Properties of Liquid Metals | "B" | Tokyo
JAPAN | Sept. 3—8 |
| inf.: Prof. M. TANAKA
Department of Applied Science
Faculty of Engineering
Tohoku University
Sendai 980, JAPAN. | | | |
| 12. Luminescence | "A" | Leningrad
USSR | August 6 |
| inf.: Prof. E. F. BERTAUT
Secretary of the Commission
Lab. d'Électrostatique
Cedex 166
38 Grenoble-Gare, FRANCE. | | | |

Commission on Particles and Fields

- | | | | |
|--|-----|----------------------|------------|
| 13. XVI Int. Conf. on High Energy Physics | "A" | Chicago
Ill., USA | Sept. 6—13 |
| inf.: Prof. R. R. WILSON
N. A. L.
Box 500
Batavia, Illinois 60 510, USA. | | | |
| 14. Int. Conf. on Hadronic Collisions | "B" | Oxford
UK | April 5—7 |
| inf.: Dr. G. MANNING
R. H. E. L.
Chilton, Didcot
Berkshire, UNITED KINGDOM. | | | |

15. 4th Int. Conf. on Magnet Technology "B" Brookhaven Sept. 19—22:
New York, USA
inf.: Dr. J. P. BLEWETT
Brookhaven National Laboratory
Upton, L. I.
New York 11973, USA.

Commission on Nuclear Physics

16. Few Particle Problems on the Nuclear Interaction "B" Los Angeles Aug. 28—
Calif., USA Sept. 1 st
inf.: Dr. IVO SLAUS
Physics Department
University of California
Los Angeles, Calif. 90024, USA.
17. Nuclear Moments and Nuclear Structure "B" Osaka Sept. 1—8
JAPAN
inf.: Dr. Kenzo SUGIMOTO
Department of Physics
Osaka University
Toyonaka
Osaka 560, JAPAN.
18. 6th Int. Cyclotron Conference "B" Vancouver July 18—21
CANADA
inf.: Dr. M. K. CRADDOCK
TRIUMF
University of British Columbia
Vancouver 8, B. C., CANADA.

Commission on Physics Education

19. Int. Congress on Teaching Physics "B" Kiel July 20—26
to Students in Physics, Related Sciences and Engineering F. G. GERMANY
inf.: Prof. W. KROEBEL
Institute for Applied Physics
University of Kiel
New University House 34
23 Kiel, FEDERAL REPUBLIC of GERMANY.

Commission on Atomic & Molecular Physics and Spectroscopy

20. Conf. on Inner Shell Ionization "B" Atlanta April 17—21
USA
inf.: Dr. R. W. FINK
Chemistry Department
Georgia Institute of Technology
Atlanta, Georgia, USA.
21. 3rd Int. Conf. on Atomic Physics "A" Boulder Aug. 7—11
USA
inf.: Dr. S. J. SMITH
J. I. L. A.
University of Colorado
Boulder, Colorado 80302, USA.
22. XVII Congress Ampère "C" Tirku Aug. 21—26
FINLAND
inf.: Prof. V. HOVI
Wihuri Physical Laboratory
University of Tirku
Tirku, FINLAND.

23. 1st Int. Conf. on Modulation Spectroscopy "B" Tucson USA Nov. 23—26
inf.: Prof. B. O. SERAPHIN
Optical Sciences Center
University of Arizona
Tucson, Arizona 85 721, USA.
- International Commission for Optics*
24. 9th Congress of ICO: Space Optics "A" Santa Monica Calif., USA Oct. 9—13
inf.: Dr. D. S. NICHOLSON
P. O. Box 95 213
Los Angeles, California 90 045, USA.
25. Integrated Optics — Guided Waves, Materials and Devices "B" Las Vegas Nevada, USA Feb. 7—9
inf.: Dr. R. V. POLE
OSA
2100 Pennsylvania Avenue NW
Washington, D. C. 20 037, USA.

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. VII. 15. — Terjedelem: 7 (A/5) ív
71-3817 — Szegedi Nyomda

Gombás Pál—Kisdi Dávid

BEVEZETÉS AZ ELMÉLETI FIZIKÁBA

Két kötetben

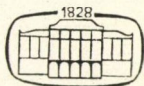
A könyv célkitűzése a modern elméleti fizika egész tárgykörének bemutatása. Az első kötet a klasszikus fizika fejezeteit, tehát a mechanikát, az elektrodinamikát a hullámoptikával, a termodinamikát és a relativitáselméletet tartalmazza. E fejezetekben a könyv nagymértékben támaszkodik a magyar felsőoktatás kialakult módszertanára, és az egyetemeken tanított anyag mélyebb megértését és több oldalról való megvilágítását kívánja elérni.

A második kötet az anyag korpuszkuláris elméletével, a statisztikus mechanikával és a kvantumfizikával foglalkozik. E terület igen nagy kiterjedésű és állandóan újabb eredményekkel gazdagodik. A könyv anyaga úgy van kiválasztva, hogy a legfontosabb területek alapjait tárgyalja anélkül, hogy túlságosan a részletekbe hatolna.

1. kötet: 643 oldal, 244 ábra

2. kötet: 638 oldal, 131 ábra

A két kötet ára 226,— Ft



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST

Gombás Pál

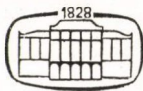
FIZIKA MÉRNÖKÖK SZÁMÁRA

Ez a kötet mérnökök számára ad bevezetést a fizika alapjaiba. Azokat a fizikai alapismereteket, törvényeket tartalmazza, amelyekre a műszaki egyetemek hallgatói — a felsőoktatási reform kívánalmainak megfelelően — további tanulmányaik során támaszkodhatnak, és amely ismeretanyag felelevenítése a már működő mérnökök és más szakemberek számára is hasznos.

Több, egymástól függetlenül is tanulmányozható részből áll, melyek a következők: mechanika, relativitáselmélet, hangtan, hőtan, elektromosság, fénytan és atomfizika. A könyv végén található függelék egyrészt néhány alkalmazott matematikai tételt foglal össze a vektoralízis köréből, másrészt áttekintést ad a gyakorlatban legelterjedtebb mértékrendszerekről.

A fizika egyes fejezeteinek feldolgozásában a szerző minden esetben a tapasztalatból indul ki, így módszere logikai szempontból az egyesről az általánosra való következtetés, tehát az indukció.

564 oldal. Kötve 100,— Ft



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Kemény Péter: A radioaktív felezési idő megváltoztatása kémiai, illetve fizikai behatásokkal</i>	483
<i>Adatok fizikai, illetve fizikával kapcsolatos kutatásokkal foglalkozó hazai intézményekre vonatkozóan</i>	495
<i>A Magyar Tudományos Akadémia Intézetei</i>	497
<i>Tudományegyetemek</i>	509
<i>Orvostudományi Egyetemek</i>	521
<i>Műszaki Egyetemek</i>	532
<i>Országos kutató intézetek</i>	540
<i>Ipari kutató intézetek</i>	550
<i>A IUPAP hírei</i>	556